O'REILLY®



图灵程序设计丛书



Spark
高级数据分析

Advanced Analytics with Spark

[美] Sandy Ryza [美] Uri Laserson
[英] Sean Owen [美] Josh Wills 著
龚少成 译


中国工信出版集团


人民邮电出版社
POSTS & TELECOM PRESS

数字版权声明

译者介绍



龚少成

清华大学硕士，现任肯睿（上海）软件有限公司售前技术经理。曾在亿贝中国软件开发中心任高级软件工程师，后来就职于英特尔亚太研发有限公司，是大数据解决方案部门金融行业团队的技术负责人。他有十年软件行业经验，最近四年专注于Hadoop解决方案和应用的开发。在中国农业银行大数据平台、上海电信3G无线网络优化和太平洋保险大数据平台项目中担任关键角色，并提供Hadoop咨询服务，开发Hadoop关键组件应用。他还参与了宁波银行、华泰证券、东方证券等大数据平台的建设并提供咨询服务。他同时也是Cloudera公司认证CCAH讲师，有丰富的CCAH培训和授课经验。

 图灵程序设计丛书

Spark高级数据分析

Advanced Analytics with Spark

[美] Sandy Ryza [美] Uri Laserson [英] Sean Owen [美] Josh Wills 著
龚少成 译

O'REILLY®

Beijing • Cambridge • Farnham • Köln • Sebastopol • Tokyo
O'Reilly Media, Inc.授权人民邮电出版社出版

人 民 邮 电 出 版 社
北 京

图书在版编目（C I P）数据

Spark高级数据分析 / （美） 里扎 （Ryza,S.） 等著 ；
龚少成译. -- 北京 : 人民邮电出版社, 2015.11（2016.2重印）
（图灵程序设计丛书）
ISBN 978-7-115-40474-9

Ⅰ. ①S… Ⅱ. ①里… ②龚… Ⅲ. ①数据处理软件
Ⅳ. ①TP274

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第225780号

内 容 提 要

本书是使用 Spark 进行大规模数据分析的实战宝典，由著名大数据公司 Cloudera 的数据科学家撰写。四位作者首先结合数据科学和大数据分析的广阔背景讲解了 Spark，然后介绍了用 Spark 和 Scala 进行数据处理的基础知识，接着讨论了如何将 Spark 用于机器学习，同时介绍了常见应用中几个最常用的算法。此外还收集了一些更加新颖的应用，比如通过文本隐含语义关系来查询 Wikipedia 或分析基因数据。

本书适合从事大数据分析的各类专业人员阅读。

◆ 著　[美] Sandy Ryza [美] Uri Laserson
[英] Sean Owen [美] Josh Wills
译　龚少成
责任编辑　岳新欣
执行编辑　李松峰
责任印制　杨林杰

◆ 人民邮电出版社出版发行　北京市丰台区成寿寺路11号
邮编　100164　电子邮件　315@ptpress.com.cn
网址　http://www.ptpress.com.cn
北京　印刷

◆ 开本：800×1000　1/16
印张：15.25
字数：360千字　2015年 11 月第 1 版
印数：4 001 – 6 000册　2016年 2 月北京第 2 次印刷
著作权合同登记号　图字：01-2015-3956号

定价：59.00元

读者服务热线：(010)51095186转600　印装质量热线：(010)81055316

反盗版热线：(010)81055315

广告经营许可证：京崇工商广字第 0021 号

版权声明

O’Reilly Media, Inc.介绍

O’Reilly Media 通过图书、杂志、在线服务、调查研究和会议等方式传播创新知识。自 1978 年开始，O’Reilly 一直都是前沿发展的见证者和推动者。超级极客们正在开创着未来，而我们关注真正重要的技术趋势——通过放大那些“细微的信号”来刺激社会对新科技的应用。作为技术社区中活跃的参与者，O’Reilly 的发展充满了对创新的倡导、创造和发扬光大。

O’Reilly 为软件开发人员带来革命性的“动物书”；创建第一个商业网站（GNN）；组织了影响深远的开放源代码峰会，以至于开源软件运动以此命名；创立了 Make 杂志，从而成为 DIY 革命的主要先锋；公司一如既往地通过多种形式缔结信息与人的纽带。O’Reilly 的会议和峰会集聚了众多超级极客和高瞻远瞩的商业领袖，共同描绘出开创新产业的革命性思想。作为技术人士获取信息的选择，O’Reilly 现在还将先锋专家的知识传递给普通的计算机用户。无论是通过书籍出版、在线服务或者面授课程，每一项 O’Reilly 的产品都反映了公司不可动摇的理念——信息是激发创新的力量。

业界评论

“O’Reilly Radar 博客有口皆碑。”

——*Wired*

“O’Reilly 凭借一系列（真希望当初我也想到了）非凡想法建立了数百万美元的业务。”

——*Business 2.0*

“O’Reilly Conference 是聚集关键思想领袖的绝对典范。”

——*CRN*

“一本 O’Reilly 的书就代表一个有用、有前途、需要学习的主题。”

——*Irish Times*

“Tim 是位特立独行的商人，他不光放眼于最长远、最广阔的视野，并且切实地按照 Yogi Berra 的建议去做了：‘如果你在路上遇到岔路口，走小路（岔路）。’回顾过去，Tim 似乎每一次都选择了小路，而且有几次都是一闪即逝的机会，尽管大路也不错。”

——*Linux Journal*

目录

推荐序

数据的爆炸式增长和隐藏在这些数据背后的商业价值催生了一代又一代的大数据处理技术。十年前 Hadoop 横空出世，Cloudera 首席架构师 Doug Cutting 先生将 Google 的 MapReduce 思想用开源的方式实现出来，由此拉开了基于 MapReduce 的大数据处理框架在企业中应用的序幕。最近几年，Hadoop 生态系统又发展出以 Spark 为代表的新计算框架。相比 MapReduce，Spark 速度快，开发简单，并且能同时兼顾批处理和实时数据分析。Spark 起源于加州大学伯克利分校的 AMPLab，Cloudera 公司作为大数据市场上的翘楚很早就开始将 Spark 推广到广大企业级客户并积累了大量的经验。*Advanced Analysis with Spark* 一书正是这些经验的结晶。另一方面，企业级用户在引入 Spark 技术时碰到的最大难题之一就是能够灵活应用 Spark 技术的人才匮乏。听闻 Cloudera 中国公司的龚少成在与图灵公司一起为 *Advanced Analysis with Spark* 一书的中文版在日夜奋战，我便欣然作序，也算是为国内企业更好地应用 Spark 技术尽自己的一份力量！

本书开篇介绍了 Spark 的基础知识，然后详细介绍了如何将 Spark 应用到各个行业。与许多书籍只着重描述最终方案不同，本书作者在介绍案例时把解决问题的整个过程也展现了出来。在介绍一个主题时，并不是一开始就给出最终方案，而是先给出一个最初并不完善的方案，然后指出方案的不足，引导读者思考并逐步改进，最终得出一个相对完善的方案。这体现了工程问题的解决思路，也体现了大数据分析是一个迭代的过程，这样的论述方式更能激发读者的思考，这一点实在难能可贵。

本书英文版自出版以来在亚马逊网站大数据分析类书籍中一直名列前茅，而且获得的多为五星级评价，可见国外读者对该书的喜爱。本书中文版译者龚少成技术扎实，在英特尔和 Cloudera 工作期间带领团队成功实施过许多大数据平台项目，而且其英语功底也相当扎实，此外我偶然得知他还是国内少数通过高级口译考试的专业人才。所以本书的中文版交给龚少成翻译实在是件让人欣慰的事情。本书中文版初稿也证实了我的判断，不仅保持了英文版的风格，而且语言也十分流畅。如果你了解 Scala 语言，还有一些统计学和机器学习基础，那么本书是你学习 Spark 时必备的书籍之一！

——苗凯翔，Cloudera 公司副总裁

译者序

大数据是这几年科技和应用领域炙手可热的话题，而 Spark 又是大数据领域里最活跃的技术。对 Spark 这个技术，国内研究比较多的是原理和源代码，而许多客户抱怨 Spark 应用落地难。造成这一现象的一个主要原因是 Spark 技术比较新，许多应用还处在探索阶段。Cloudera 公司作为全球大数据领域的领头羊，在给全球客户提供最高质量大数据平台的同时，也积累了许多 Spark 应用方面的宝贵经验。本书四位作者均为 Cloudera 公司的数据科学家，也长期为客户提供专业的数据分析服务。可以说，本书的出版将为 Spark 数据分析项目的落地起到巨大的推动作用。

同时我也注意到，国内 Spark 数据分析方面的书籍少，而且许多书籍都停留在源代码研究的层面上。当然，这些书中也不乏非常优秀的作品，但我认为 Spark 真正的力量在于其开发的大数据应用。所以早在本书还处于初期编写过程中时，我就自告奋勇和作者联系中文版事宜，希望以此为中国的大数据分析事业略尽绵力。

本书在翻译过程中得到了许多人的帮助。首先要感谢我在 Cloudera 公司的同事，也就是本书的四位作者。在本书的翻译过程中，由于不同语言的习惯问题，四位作者 Sandy Ryza、Uri Laserson、Sean Owen 和 Josh Wills 花了许多时间和我交流。本人之所以有幸负责本书的中文版翻译，也是承蒙 Sean Owen 的引荐。感谢 Cloudera 公司全球副总裁凌琦先生和苗凯翔博士，没有两位领导的努力，Cloudera 中国区团队不可能如此迅速组建并形成如此强大的战斗力，我也无法参与到轰轰烈烈的大数据事业中。感谢我的同事田占凤博士和陈建忠的鼓励，中文版的翻译工作才得以开始。英特尔亚太研发公司工程师邱鑫对本书初稿的修改贡献了许多宝贵建议。同时本书在翻译过程中还得到了 Cloudera 公司中国区同事刘贺峰、糜君、陈飚、陈新江、李大超和张莉苹的鼎力帮助。感谢图灵公司的李松峰编辑和岳新欣编辑在翻译过程中的指导和仔细审阅。由于本书的翻译都是在周末完成的，所以要特别感谢我的妻子周幼琼在每个周末对我的照顾。

由于本人的水平有限，同时本书涉及许多课题，所以现有译文中难免存在纰漏之处。希望读者能够不吝赐教，发现问题时麻烦和我联系。邮件请发送至 gongshaocheng@gmail.com。

龚少成
2015 年 7 月于上海

序

自从在加州大学伯克利分校创立 Spark 项目起，我就时常心潮澎湃。不仅因为 Spark 可以帮助人们快速构建并行系统，更因为 Spark 帮助了越来越多的人使用大规模计算。因此看到这本介绍 Spark 高级分析的书，我非常欣慰！该书由数据科学领域四位专家 Sandy、Uri、Sean 和 Josh 携手打造。四位作者研习 Spark 已久，他们在本书中跟读者分享了关于 Spark 的大量精彩内容，同时本书的案例部分同样出众！

对于这本书，我最钟爱的是它强调案例，而且这些案例都源于现实数据和实际应用。找到一个像样的、能在笔记本电脑上运行的大数据案例已经很难，更遑论十个了。但本书作者做到了！作者为大家准备好了一切，只等你在 Spark 中运行它们。更难能可贵的是，作者不仅讨论了核心算法，更倾心于数据准备和模型调优，没有这些工作，实际项目中就无法得到好的结果。认真研读此书，你应该可以吸收这些案例中的概念并直接将其运用在自己的项目中！

大数据处理无疑是当今计算领域最激动人心的方向之一，发展非常迅猛，新思想层出不穷。愿本书能帮助你在这个崭新的领域中扬帆启航！

Matei Zaharia
Databricks 公司 CTO 兼 Apache Spark 项目副总裁

前言

作者：Sandy Ryza

我不想我的人生有很多遗憾。2011 年的某个慵懒的时刻，我在正绞尽脑汁地想如何把高难度的离散优化问题最优地分配给计算机集群处理，真是很难想到有什么好方法。我的导师跟我讲，他听说有个叫 Spark 的新技术，可我基本上没当回事。Spark 的想法太好了，让人觉得有点儿不靠谱。就这样，我很快又回去接着写 MapReduce 的本科毕业论文了。时光荏苒，Spark 和我都渐渐成熟，但我们之间有一个已然成为冉冉之星，这让人不禁感叹"Spark"（星星之火）这个双关语是多么贴切。两年后，Spark 的价值举世皆知！

Spark 的前辈有很多，从 MPI 到 MapReduce。利用这些计算框架，我们写的程序可以充分利用大量资源，但不需要关心分布式系统的实现细节。数据处理的需求促进了这些技术框架的发展。同样，大数据领域也和这些框架关系密切，这些框架界定了大数据的范围。Spark 有望更进一步，让写分布式程序就像写普通程序一样。

Spark 能大大提升 ETL 流水作业的性能，并把 MapReduce 程序员从每天问天天不灵、问地地不应的绝望痛苦中解救出来。对我而言，Spark 的激动人心之处在于，它真正打开了复杂数据分析的大门。Spark 带来了支持迭代式计算和交互式探索的模式。利用这一开源计算框架，数据科学家终于可以在大数据集上高效地工作了。

我认为数据科学教学最有效的方法是利用实例。为此，我和同事一起编撰了这本关于实际应用的书，希望它能涵盖大规模数据分析中最常用的算法、数据集和设计模式。阅读本书时不必一页一页地看，可以根据工作需要或按兴趣直接翻到相关章节。

本书内容

第 1 章结合数据科学和大数据分析的广阔背景来讨论 Spark。随后各章在介绍 Spark 数据

分析时都自成一体。第 2 章通过数据清洗这一使用场景来介绍用 Spark 和 Scala 进行数据处理的基础知识。接下来几章深入讨论如何将 Spark 用于机器学习，介绍了常见应用中几个最常用的算法。其余几章则收集了一些更新颖的应用，比如通过文本隐含语义关系来查询 Wikipedia 或分析基因数据。

使用代码示例

补充材料（代码示例、练习、勘误表等）可以从 https://github.com/sryza/aas 下载。

本书是要帮你完成工作的。一般来说，如果本书提供了示例代码，你可以把它用在你的程序或文档中。除非你使用了很大一部分代码，否则无需联系我们获得许可。比如，用本书的几个代码片段写一个程序就无需获得许可，销售或分发 O'Reilly 图书的示例光盘则需要获得许可；引用本书中的示例代码回答问题无需获得许可，将书中大量的代码放到你的产品文档中则需要获得许可。

我们很希望但并不强制要求你在引用本书内容时加上引用说明。引用说明一般包括书名、作者、出版社和 ISBN。比如："*Advanced Analytics with Spark* by Sandy Ryza, Uri Laserson, Sean Owen, and Josh Wills (O'Reilly). Copyright 2015 Sandy Ryza, Uri Laserson, Sean Owen, and Josh Wills, 978-1-491-91276-8."

如果你觉得自己对示例代码的用法超出了上述许可的范围，欢迎你通过 permissions@oreilly.com 与我们联系。

Safari® Books Online



Safari Books Online（http://safaribooksonline.com）是应运而生的数字图书馆。它同时以图书和视频的形式出版世界顶级技术和商务作家的专业作品。技术专家、软件开发人员、Web 设计师、商务人士和创意专家等，在开展调研、解决问题、学习和认证培训时，都将 Safari Books Online 视作获取资料的首选渠道。

对于组织团体、政府机构和个人，Safari Books Online 提供各种产品组合和灵活的定价策略。

用户可通过一个功能完备的数据库检索系统访问 O'Reilly Media、Prentice Hall Professional、Addison-Wesley Professional、Microsoft Press、Sams、Que、Peachpit Press、Focal Press、Cisco Press、John Wiley & Sons、Syngress、Morgan Kaufmann、IBM Redbooks、Packt、Adobe Press、FT Press、Apress、Manning、New Riders、McGraw-Hill、Jones & Bartlett、Course Technology 以及其他几十家出版社（https://www.safaribooksonline.com/our-library/）

的上千种图书、培训视频和正式出版之前的书稿。要了解 Safari Books Online 的更多信息，我们网上见。

联系我们

请把对本书的评价和问题发给出版社。

美国：

O’Reilly Media, Inc.
1005 Gravenstein Highway North
Sebastopol, CA 95472

中国：

北京市西城区西直门南大街 2 号成铭大厦 C 座 807 室（100035）
奥莱利技术咨询（北京）有限公司

O’Reilly 的每一本书都有专属网页，你可以在那儿找到本书的相关信息，包括勘误表、示例代码以及其他信息。本书的网站地址是：
http://shop.oreilly.com/product/0636920035091.do

对于本书的评论和技术性问题，请发送电子邮件到：
bookquestions@oreilly.com

要了解更多 O’Reilly 图书、培训课程、会议和新闻的信息，请访问以下网站：
http://www.oreilly.com

我们在 Facebook 的地址如下：
http://facebook.com/oreilly

请关注我们的 Twitter 动态：
http://twitter.com/oreillymedia

我们的 YouTube 视频地址如下：
http://www.youtube.com/oreillymedia

致谢

如果没有 Apache Spark 和 MLlib，就没有本书。所以我们应该感谢开发了 Spark 和 MLlib 并将其开源的团体，也要感谢那些添砖加瓦的数以百计的代码贡献者。

我们还要感谢本书的每一位审阅者，感谢他们花费了大量的时间来审阅本书的内容，感谢他们的专业视角，他们是 Michael Bernico、Ian Buss、Jeremy Freeman、Chris Fregly、Debashish Ghosh、Juliet Hougland、Jonathan Keebler、Frank Nothaft、Nick Pentreath、Kostas Sakellis、Marcelo Vanzin 和另一位 Juliet Hougland。谢谢你们所有人！我们欠你们一个大人情！你们的努力大大改进了本书的结构和质量。

我（Sandy）还要感谢 Jordan Pinkus 和 Richard Wang，你们帮助我完成了风险分析章节的原理部分。

感谢 Marie Beaugureau 和 O’Reilly 出版社在本书出版和发行过程中贡献的宝贵经验和大力支持！

第1章

大数据分析

作者：Sandy Ryza

（数据应用）就像香肠，最好别看见它们是怎么做出来的。

——Otto von Bismarck

- 用数千个特征和数十亿个交易来构建信用卡欺诈检测模型
- 向数百万用户智能地推荐数百万产品
- 通过模拟包含数百万金融工具的投资组合来评估金融风险
- 轻松地操作成千上万个人类基因的相关数据以发现致病基因

5 到 10 年前想要完成上述任务困难重重。我们说生活在“大数据”时代，其意思是指我们拥有收集、存储、处理大量信息的工具，而这些信息的规模以前我们闻所未闻。这些能力的背后是许多开源软件组成的生态系统，它们能利用大量普通计算机处理大规模数据。Apache Hadoop 之类的分布式系统已经进入主流，并被广泛部署在几乎各个领域的组织里。

但就像锉刀和石头本身并不构成雕塑一样，有了工具和数据并不等于就可以做有用的事情。这时我们就需要“数据科学”了。雕刻是利用工具将原始石材变成普通人都能看懂的雕塑，数据科学则是利用工具将原始数据变成对不懂数据科学的普通人有价值的东西。

通常“做有用的事情”指给数据加上模式并用 SQL 来回答问题，比如：“注册过程中许多用户进入到第三个页面，其中有多少用户年龄超过 25 岁？”如何结构化数据并组织信息来回答此类问题涉及面很广，本书不对其细节过多赘述。

有时候“产生价值”需要多付出一些努力。SQL 可能仍扮演重要角色，但为了处理数据的特质或进行复杂分析，人们需要一个更灵活、更易用的，且在机器学习和统计方面功能更丰富的编程模式。本书将重点讨论此类型的分析。

长久以来，人们利用 R、PyData 和 Octave 等开源框架可以在小数据集上进行快速分析和建模。只需不到 10 行代码，就可以利用数据集的一部分数据构建出机器学习模型，再利用该模型预测其余数据的分类。如果多写几行代码，我们还能处理遗失数据，尝试多个模型并从中找出最佳模型，或者用一个模型的结果作为输入来拟合另一个模型。但如果数据集巨大，必须利用大量计算机来达到相同效果，我们该怎样做呢？

一个可能正确的方法是简单扩展这些框架使之能运行在多台机器上，保留框架的编程模型，同时重写其内核使之在分布式环境下能顺利运行。但是，分布式计算难度大，我们必须重新思考在单机系统中的许多基本假设在分布式环境下是否依然成立。比如，由于集群环境下数据需要在多个节点间切分，网络传输速度比内存访问慢几个数量级，如果算法涉及宽数据依赖，情况就很糟糕。随着机器数量的增加，发生故障的概率也相应增加。这些实际情况要求编程模式适配底层系统：编程模式要防止不当选项并简化高度并行代码的编写。

当然，除了像 PyData 和 R 这样在软件社区里表现优异的单机工具，数据分析还用到其他工具。在科学领域，比如常常涉及大规模数据的基因学，人们使用并行计算框架已经有几十年的历史了。今天，在这些领域处理数据的人大多数都熟悉 HPC（High-Performance Computing，高性能计算）集群计算环境。然而，PyData 和 R 的问题在于它们很难扩展。同样，HPC 的问题在于它的抽象层次较低，难于使用。比如要并行处理一个大 DNA 测序文件，人们需要手工将该文件拆成许多小文件，并为每个小文件向集群调度器提交一个作业。如果某些作业失败，用户需要检查失败并手工重新提交。如果操作涉及整个数据集，比如对整个数据集排序，庞大的数据集必须流入单个节点，否则科学家就要用 MPI 这样底层的分布式框架。这些底层框架使用难度大，用户必须精通 C 语言和分布式 / 网络系统。这些工具为 HPC 环境编写，往往很难将内存数据模型和底层存储模型独立开来。比如很多工具只能从单个流读取 POSIX 文件系统数据，很难自然并行化，不能用于读取数据库等其他后台存储。最近，Hadoop 生态系统提供了抽象，让用户使用计算机集群就像使用单台计算机一样。该抽象自动拆分文件并在多台计算机上分布式存储，自动将工作拆分成若干粒度更小的任务并分布式执行，出错时自动恢复。Hadoop 生态系统将大数据集处理涉及的许多琐碎工作自动化，并且启动开销比 HPC 小得多。

1.1　数据科学面临的挑战

数据科学界有几个硬道理是不能违背的，Cloudera 数据科学团队的一项重要职责就是宣扬这些硬道理。一个系统要想在海量数据的复杂数据分析方面取得成功，必须要明白这些硬道理，至少不能违背这些硬道理。

第一，成功的分析中绝大部分工作是数据预处理。数据是混乱的，在让数据产生价值之前，必须对数据进行清洗、处理、融合、挖掘和许多其他操作。特别是对大数据集，由于人们很难直接检查，为了知道需要哪些预处理步骤，甚至需采用计算方法。一般情况下，即使在模型调优阶段，在整个数据处理管道各个作业中，花在特征提取和选择上的时间比选择和实现算法的时间还要多。

比如，在构建网站欺诈交易检测模型时，数据科学家需要从许多可能的特征中进行选择。这些特征包括必填项、IP 地址信息、登录次数、用户浏览网站时的点击日志等。在将特征转换成适用于机器学习算法的向量时，每个特征可能都会有不同的问题。系统需要支持更灵活的转换，远远不止是将二维双精度数组转换成一个数学模型那么简单。

第二，*迭代*与数据科学紧密相关。建模和分析经常需要对一个数据集进行多次遍历。这其中一方面是由机器学习算法和统计过程*本身*造成的。常用的优化过程，比如随机梯度下降和最大似然估计，在收敛前都需要多次扫描输入数据。数据科学家自身的工作流程也涉及迭代。在初步调查和理解数据集时，一个查询的结果往往给下一个查询带来启示。在构建模型时，数据科学家往往很难在第一次就得到理想的结果。选择正确的特征，挑选合适的算法，运行恰当的显著性测试，找到合适的超参数，所有这些工作都需要反复试验。框架每次访问数据都要读磁盘，这样会增加时延，降低探索数据的速度，限制了数据科学家进行试验的次数。

第三，构建完表现卓越的模型不等于大功告成。数据科学的目标在于让数据对不懂数据科学的人有用。把模型以许多回归权值的形式存成文本文件放在数据科学家的计算机里，这样做根本没有实现数据科学的目标。数据推荐引擎和实时欺诈检测系统是最常见的数据应用。这些应用中模型作为生产服务的一部分，需要定期甚至是实时重建。

在这些场景中，有必要区别分析是*试验环境*还是*生产环境*。在试验环境下，数据科学家进行探测式分析。他们想理解工作数据集的本质。他们将数据图形化并用各种理论来测试。他们用各种特征做试验，用辅助数据源来增强数据。他们试验各种算法，希望从中找到一两个有效算法。在生产环境下，构建数据应用时，数据科学家进行操作式分析。他们把模型打包成服务，这些服务可以作为现实世界的决策依据。他们跟踪模型随时间的表现，哪怕是为了将模型准确度提高一个百分点，他们都会精心调整模型并且乐此不疲。他们关心服务 SLA 和在线时间。由于历史原因，探索式分析经常使用 R 之类的语言，但在构建生产应用时，数据处理过程则完全用 Java 或 C++ 重写。

当然，如果用于建模的原始代码也可用于生产应用，那就能节省每个人的时间。但像 R 之类的语言运行缓慢，很难将其与生产基础设施的技术平台进行集成，而 Java 和 C++ 之类的语言又很难用于探索式分析。它们缺乏交互式数据操作所需的 REPL（Read-Evaluate-Print-Loop，读取 – 计算 – 打印 – 循环）环境，即使是简单的转换，也需要写大量代码。人们迫切需要一个既能轻松建模又适合生产系统的框架。

1.2 认识Apache Spark

该介绍 Apache Spark 了。Spark 是一个开源框架，作为计算引擎，它把程序分发到集群中的许多机器，同时它提供了一个优雅的编程模型。Spark 源自加州大学伯克利分校的 AMPLab，现在已被捐献给了 Apache 软件基金会。可以这么说，对于数据科学家而言，真正让分布式编程进入寻常百姓家的开源软件，Spark 是第一个。

了解 Spark 的最好办法莫过于了解相比于它的前辈 MapReduce，Spark 有哪些进步。MapReduce 革新了海量数据计算的方式，为运行在成百上千台机器上的并行程序提供了简单的编程模型。MapReduce 引擎几乎可以做到线性扩展：随着数据量的增加，可以通过增加更多的计算机来保持作业时间不变。而且 MapReduce 是健壮的。故障虽然在单台机器上很少出现，但在数千个节点的集群上却总是出现。对于这种情况，MapReduce 也能妥善处理。它将工作拆分成多个小的任务，能优雅地处理任务失败，并且不影响任务所属作业的正确执行。

Spark 继承了 MapReduce 的线性扩展性和容错性，同时对它做了一些重量级扩展。首先，Spark 摒弃了 MapReduce 先 map 再 reduce 这样的严格方式，Spark 引擎可以执行更通用的有向无环图（DAG）算子。这就意味着，在 MapReduce 中需要将中间结果写入分布式文件系统时，Spark 能将中间结果直接传到流水作业线的下一步。在这方面，它类似于 Dryad（http://research.microsoft.com/en-us/projects/dryad/）。Dryad 也是从 MapReduce 衍生出来的，起源于微软研究院。其次，它也补充了这种能力，通过提供许多转换操作，用户可以更自然地表达计算逻辑。Dryad 更加面向开发人员，其流式 API 可以做到用几行代码表示复杂的流水作业。

第三，Spark 扩展了前辈们的内存计算能力。它的弹性分布式数据集（RDD）抽象使开发人员将流水处理线上的任何点物化在跨越集群节点的内存中。这样后续步骤如果需要相同数据集时就不必重新计算或从磁盘加载。这个特性使 Spark 可以应用于以前分布式处理引擎无法胜任的应用场景中。Spark 非常适合用于涉及大量迭代的算法，这些算法需要多次遍历相同数据集。Spark 也适用于反应式（reactive）应用，这些应用需要扫描大量内存数据并快速响应用户的查询。

或许最重要的是，Spark 契合了前面提到的数据科学领域的硬道理。它认识到构建数据应用的最大瓶颈不是 CPU、磁盘或者网络，而是分析人员的生产率。通过将预处理到模型评价的整个流水线整合在一个编程环境中，Spark 大大加速了开发过程。这一点尤为值得称赞。Spark 编程模型富有表达力，在 REPL 下包装了一组分析库，省去了多次往返 IDE 的开销。而这些开销对诸如 MapReduce 等框架来说是无法避免的。Spark 还避免了采样和从 HDFS 来回倒腾数据所带来的问题，这些问题是 R 之类的框架经常遇到的。分析人员在数据上做实验的速度越快，他们能从数据中挖掘出价值的可能性就越大。

在数据处理和ETL方面，Spark的目标是成为大数据界的Python而不是大数据界的Matlab。作为一个通用的计算引擎，它的核心API为数据转换提供了强大的基础，它独立于统计学、机器学习或矩阵代数的任何功能。它的Scala和Python API让我们可以用表达力极强的通用编程语言编写程序，还也可以访问已有的库。

Spark的内存缓存使它适应于微观和宏观两个层面的迭代计算。机器学习算法需要多次遍历训练集，可以将训练集缓存在内存里。在对数据集进行探索和初步了解时，数据科学家可以在运行查询的时候将数据集放在内存，也很容易将转换后的版本缓存起来，这样就节省了访问磁盘的开销。

最后，Spark在探索型分析系统和操作型分析系统之间搭起一座桥梁。我们经常说，数据科学家比统计学家更懂软件工程，而比软件工程师更懂统计学。基本上讲，Spark比探索型系统更像操作型系统，而比操作型系统常见的技术则更善于数据探索。Spark从根本上是为性能和可靠性而生的。由于构建于JVM之上，它可以利用许多Java技术栈里的操作和调试工具。

Spark还紧密集成Hadoop生态系统里的许多工具。它能读写MapReduce支持的所有数据格式，可以与Hadoop上的常用数据格式，如Avro和Parquet（当然也包括古老的CSV），进行交互。它能读写NoSQL数据库，比如HBase和Cassandra。它的流式处理组件Spark Streaming能连续从Flume和Kafka之类的系统读取数据。它的SQL库SparkSQL能和Hive Metastore交互，而且在另外一个项目中Spark还能替代MapReduce作为Hive的底层执行引擎，该项目在本书撰写时还在处于开发过程。它可以运行在Hadoop集群调度和资源管理器YARN之上，这样Spark可以和MapReduce和Impala等其他处理引擎动态共享集群资源和管理策略。

当然，Spark并不完美。虽然它的核心引擎在成熟度上不断进步，即使是在本书撰写期间也是如此，但Spark相比MapReduce仍然很年轻，其批处理能力仍然比不过MapReduce。它的各个特殊子组件，比如流式处理、SQL、机器学习和图处理，分别处在不同的成熟阶段，每次升级API变化较大。比如说，MLlib的流水线和转换API模型在本书写作时还在开发之中。它的统计和建模功能跟R等单机版语言还没有可比性。它的SQL功能虽然丰富，但和Hive的SQL功能相比差距还非常大。

1.3 关于本书

本书接下来的部分不会继续讨论Spark的优缺点。本书也不会涉及其他几个话题。本书会介绍Spark的流式编程模型和Scala基础知识，但它不是一个Spark的参考书或参考大全，不会讲Spark技术细节。它也不是机器学习、统计学、线性代数的参考书，但在讲到这些知识的时候，许多章节会提供一些背景知识。

另一方面，本书将帮助读者建立用 Spark 在大规模数据集上进行复杂分析的感觉。我们会讲述整个处理过程：不但涉及模型的构建和评价，也会讲述数据清洗、数据预处理和数据探索，并会花费笔墨描述怎样将结果变成生产应用。我们认为最好的教学方法是实例，所以在快速介绍完 Spark 及其生态系统之后，本书其余各章分别讨论了在不同领域使用 Spark 进行数据分析的实例，每个实例都自成一体。

如果可能，我们尽可能做到不只是提供解决方案。我们会描述数据科学的整个工作流程，包括它所有的迭代、无解以及需要重新开始的情况。本书将有助于读者熟悉 Scala、Spark、机器学习和数据分析。但这都是为了一个更大的目标服务，我们希望本书首先教会读者如何完成本章开头部分提到的任务。每一章虽然只有薄薄的 20 来页，但我们会力求把怎样构建一个此类数据应用讲清楚讲透彻。

第2章

用Scala和Spark进行数据分析

作者：Josh Wills

世上无难事，只要肯耐烦。

——David Foster Wallace

数据清洗是数据科学项目的第一步，往往也是最重要的一步。许多灵巧的分析最后功败垂成，原因就是分析的数据存在严重的质量问题，或者数据中某些因素使分析产生偏见，或使数据科学家得出根本不存在的规律。

尽管数据清洗很重要，但数据科学相关的许多教材和课程都不讲述数据清洗，抑或一笔带过。造成这种现象的原因其实很简单：数据清洗实在是很琐碎。然而“磨刀不误砍柴工”，只有事先做了这种沉闷乏味的工作，后面你才能领略到应用机器学习算法解决新问题时的酣畅淋漓。许多道行尚浅的数据科学家往往急于求成，对数据草草处理就进行下一步工作，等到运行算法后，却发现数据有严重的质量问题（可能是计算量太大），或得出的结果完全不合理。

“垃圾进垃圾出”这样浅显的道理大家都明白，危害更大的是：数据看似合理却有很严重（但第一眼看不出来）的质量问题，你根据这样的数据也得到了看似合理的答案。许多数据科学家丢饭碗，往往就是因为这样错误地得出了重要结论。

数据科学家最为人称道的是在数据分析生命周期的每一个阶段都能发现有意思、有价值的问题。在一个分析项目的早期阶段，你投入的技能和思考越多，对最终的产品就越有信心。

当然，说起来容易做起来难。对于数据科学行业来说，这就像是告诉小孩子要多吃蔬菜。相比数据清洗，摆弄 Spark 之类新潮的工具，用它们构建花哨的机器学习算法，开发流式数据处理引擎和分析海量图数据，要好玩得多。那么，如果要介绍如何用 Spark 和 Scala 进行数据处理，有没有一种比练习数据清洗更好的方法呢？

2.1 数据科学家的Scala

对数据处理和分析，数据科学家往往都自己钟爱的工具，比如 R 或者 Python。除非不得已，数据科学家常常会坚持用他们所钟爱的工具，对于手头上的工作，他们总想方设法地沿用这些工具。即使情况再顺利，想让数据科学家采用新的工具、学习新语法和新使用模式，都困难重重。

为了能在 R 或 Python 里直接用 Spark，Spark 上开发了专门的类库和工具包。Python 有个非常好用的工具包叫作 PySpark，本书后半部分有一章有几个例子介绍它的用法。但是本书大部分例子还是用 Scala 语言编写的。Spark 框架是用 Scala 语言编写的，在向数据科学家介绍 Spark 时，采用与底层框架相同的编程语言有很多好处。

- *性能开销小*

  为了能在基于 JVM 的语言（比如 Scala）上运行用 R 或 Python 编写的算法，我们必须花费代价在不同环境中传递代码和数据，而且在转换过程中信息时有丢失。但是，如果数据分析算法用 Spark Scala API 编写，你会对程序正确运行更有信心。

- *能用上最新的版本和最好的功能*

  Spark 的机器学习、流处理和图分析库全都是用 Scala 写的，而新功能对 Python 和 R 绑定支持则要慢得多。如果想用 Spark 的全部功能（而不用花时间等待它移植到其他语言绑定），恐怕你必须学点儿 Scala 基础知识，如果想扩展这些 Spark 已有功能来解决你手头上的新问题，就更要深入了解 Scala 了。

- *有助于你更了解Spark的原理*

  即使在 Python 或 R 中调用 Spark，API 仍然反映了底层计算原理，它是 Spark 从其开发语言 Scala 继承过来的。如果你知道如何在 Scala 中使用 Spark，即使你平时主要还是在其他语言中使用 Spark，你还是会更理解系统，因此会更好地“用 Spark 思考”。

学习在 Scala 中用 Spark 还有一个好处。由于 Spark 不同于其他任何一种数据分析工具，这个好处解释起来会有点儿困难。如果你曾经用过 R 或 Python 从数据库读取数据并分析，肯定经历过用一种语言（SQL）读取和操作大量存储在远程集群的数据，然后用另一种语言（Python 或 R）来操作和展现存储在你本地机器上的信息。如果你一直这么做，时间长了你可能都不会再想这种方式有没有问题。

在 Scala 中使用 Spark 做数据分析，你的感觉是不太一样的，因为你用同样的语言完成所

有事情。借助 Spark，你用 Scala 代码读取集群上的数据。接着，你把 Scala 代码发送到集群上完成相同的转换，这些转换跟你刚刚对本地数据所做的转换完全一样，但数据却在集群上——这就是精妙之处。在同一个环境中完成所有数据处理和分析，不用考虑数据本身在何处存放和在何处处理，这简直妙不可言。这种感觉只有你亲身经历才会体会得到。我们也想确保书中的示例能够让你感受到我们首次使用 Spark 时体验到的那种魔术般的感觉。

2.2 Spark编程模型

Spark 编程始于数据集，而数据集往往存放在分布式持久化存储之上，比如 Hadoop 分布式文件系统 HDFS。编写 Spark 程序通常包括一系列相关步骤。

- 在输入数据集上定义一组转换。
- 调用 action，用以将转换后的数据集保存到持久存储上，或者把结果返回到驱动程序的本地内存。
- 运行本地计算，本地计算处理分布式计算的结果。本地计算有助于你确定下一步的转换和 action。

要想理解 Spark，就必须理解 Spark 框架提供的两种抽象：存储和执行。Spark 优美地搭配这两类抽象，可以将数据处理管道中的任何中间步骤缓在内存里以备后用。

2.3 记录关联问题

本章我们要研究的主题在许多文献和实践中被冠以许多不同的名称：身份解析、记录去重、合并 – 清除，以及列表清洗。想了解这个主题的方案和技术概况，我们需要参考这个主题的所有相关研究论文。但是由于不同文献和实践中同一个概念使用不同的名称，我们很难找到所有相关论文。在搞清楚数据清洗这个问题之前，我们得请数据科学家把与数据清洗这个概念相关的令人混淆的许多不同名称给去去重。这真让人觉得讽刺！为了方便本章余下部分论述，我们把这个问题称为*记录关联*（record linkage）。

问题的大概情况如下：我们有大量从一个或多个源系统来的记录，其中有些记录可能代表相同的基础实体，比如客户、病人、业务地址或事件。每个实体有若干属性，比如姓名、地址、生日。我们需要根据这些属性找到那些代表相同实体的记录。不幸的是，有些属性值有问题：格式不一致，或有笔误，或信息缺失。如果简单地对这些属性作相等性测试，就会漏掉许多重复记录。举个例子，我们看看表 2-1 列出的几家商店的记录。

表 2-1：记录关联问题的难点

名　　称	地　　址	城　　市	州	电　　话
Josh’s Coffee Shop	1234 Sunset Boulevard	West Hollywood	CA	(213)-555-1212
Josh Coffee	1234 Sunset Blvd West	Hollywood	CA	555-1212

（续）

名　　称	地　　址	城　　市	州	电　　话
Coffee Chain #1234	1400 Sunset Blvd #2	Hollywood	CA	206-555-1212
Coffee Chain Regional Office	1400 Sunset Blvd Suite 2	Hollywood	California	206-555-1212

表中前两行其实指同一个咖啡店，但由于数据录入错误，这两项看起来是在不同城市（West Hollywood 和 Hollywood）。相反，表中后两行其实是同一家咖啡连锁店的不同业务部门，尽管它们有相同的地址：地址 1400 Sunset Blvd #2 是咖啡店的实际地址，另一个地址 1400 Sunset Blvd Suite 2 则是公司在当地的一个办公室地点。后两项给的都是公司 Seattle 总部的官方电话号码。

这个例子清楚地说明了记录关联为什么很困难：即使两组记录看起来相似，但针对每一组中的条目，我们确定它是否重复的标准不一样。这种区别我们人类很容易理解，计算机却很难了解。

2.4　小试牛刀：Spark shell和SparkContext

我们的样例数据集来自加州大学欧文分校机器学习资料库（UC Irvine Machine Learning Repository），这个资料库为研究和教学提供了大量非常好的数据源，这些数据源非常有意义，并且是免费的。我们要分析的数据集来源于一项记录关联研究，这项研究是德国一家医院在 2010 年完成的。这个数据集包含数百万对病人记录，每对记录都根据不同标准来匹配，比如病人姓名（名字和姓氏）、地址、生日。每个匹配字段都被赋予一个数值评分，范围为 0.0 到 1.0，分值根据字符串相似度得出。然后这些数据交由人工处理，标记出哪些代表同一个人哪些代表不同的人。为了保护病人隐私，创建数据集的每个字段原始值被删除了。病人的 ID、字段匹配分数、匹配对标示（包括匹配的和不匹配的）等信息是公开的，可用于记录关联研究。

首先我们从资料库中下载数据，请在命令行中输入：

```
$ mkdir linkage
$ cd linkage/
$ curl -o donation.zip http://bit.ly/1Aoywaq
$ unzip donation.zip
$ unzip 'block_*.zip'
```

如果手头有 Hadoop 集群，可以先在 HDFS 上为块数据创建一个目录，然后将数据集文件复制到 HDFS 上：

```
$ hadoop fs -mkdir linkage
$ hadoop fs -put block_*.csv linkage
```

本书示例和代码假定读者使用 Spark 1.2.1。可以在 Spark 项目网站获取各个版本的 Spark

软件。想了解如何在集群或本地机器上安装 Spark 环境，请参考 Spark 官方文档。

现在准备工作就绪，可以启动 `spark-shell` 了。`spark-shell` 是 Scala 语言的一个 REPL 环境，它同时针对 Spark 做了一些扩展。如果这是你第一次见到 REPL 这个术语，可以把它看成一个类似 R 的环境：可以在其中用 Scala 编程语言定义函数并操作数据。

如果你有一个 Hadoop 集群，并且 Hadoop 版本支持 YARN，通过为 Spark master 设定 `yarn-client` 参数值，就可以在集群上启动 Spark 作业：

```
$ spark-shell --master yarn-client
```

如果你是在自己的计算机上运行示例，可以通过设定 `local[N]` 参数来启动本地 Spark 集群，其中 `N` 代表运行的线程数，或者用 `*` 表示使用机器上所有可用的核数。比如，要在一个 8 核的机器上用 8 个线程启动一个本地集群，可以输入以下命令：

```
$ spark-shell --master local[*]
```

在本地环境下，书中示例同样能运行。不过，这时传入的文件路径是本地路径，而不是以 `hdfs://` 开头的 HDFS 路径。注意，还需要通过 `cp block_*.csv` 将文件复制到指定的本地目录，而不是用包含解压文件的目录，因为除了许多 .csv 文件，该目录还包含其他许多文件。

本书其他 `spark-shell` 示例中不会出现 `--master` 参数，但根据环境通常需要设定该参数。

为了 Spark shell 能充分利用资源，可能还需要额外设定一些参数。比如，当 Spark 运行于本地 master 模式，可以用 `--driver-memory 2g`，这样就设定了一个本地进程使用 2 GB 内存。YARN 内存设置会更复杂，相关的选项（如 `--executor-memory` 等参数）设置可以参考 Spark on YARN 的官方文档。

运行完上述命令后，可以看到 Spark 在初始化过程中的日志消息。与此同时，也能看到一点儿 ASCII 艺术体字样，之后又是一段日志和提示符：

```
Welcome to
      ____              __
     / __/__  ___ _____/ /__
    _\ \/ _ \/ _ `/ __/  '_/
   /___/ .__/\_,_/_/ /_/\_\   version 1.2.1
      /_/
Using Scala version 2.10.4
  (Java HotSpot(TM) 64-Bit Server VM, Java 1.7.0_67)
Type in expressions to have them evaluated.
Type :help for more information.
Spark context available as sc.
scala>
```

如果你是第一次用 Spark shell（或类似的任何 Scala REPL），可以运行 `:help` 命令，该命令

列出了 shell 的所有命令。运行 :history 或 :h?，可以帮你找到之前在某个会话中写过，但一时又想不起来的变量或函数名称。运行 :paste，可以帮你插入剪贴板中的代码，这是学习本书和使用本书源代码必需的。

除了关于 :help 的提示，Spark 日志消息还显示“Spark context available as sc.”。sc 在这里是对 SparkContext 的引用，它负责协调集群上 Spark 作业的执行。继续在命令行中输入 sc：

```
sc
...
res0: org.apache.spark.SparkContext =
  org.apache.spark.SparkContext@DEADBEEF
```

REPL 会以字符形式打印对象，对于 SparkContext 对象，就是名字加上十六进制的对象内存地址（示例中显示的 DEADBEEF 是占位符，具体值每次运行时都不一样）。

sc 变量确实方便，但它的作用是什么呢？ SparkContext 是一个对象，是对象当然就有方法。想要在 Scala REPL 中查看这些方法，输入变量名加点号再加 Tab 键即可：

```
sc.[\t]
...
accumulable                  accumulableCollection
accumulator                  addFile
addJar                       addSparkListener
appName                      asInstanceOf
broadcast                    cancelAllJobs
cancelJobGroup               clearCallSite
clearFiles                   clearJars
clearJobGroup                defaultMinPartitions
defaultMinSplits             defaultParallelism
emptyRDD                     files
getAllPools                  getCheckpointDir
getConf                      getExecutorMemoryStatus
getExecutorStorageStatus     getLocalProperty
getPersistentRDDs            getPoolForName
getRDDStorageInfo            getSchedulingMode
hadoopConfiguration          hadoopFile
hadoopRDD                    initLocalProperties
isInstanceOf                 isLocal
jars                         makeRDD
master                       newAPIHadoopFile
newAPIHadoopRDD              objectFile
parallelize                  runApproximateJob
runJob                       sequenceFile
setCallSite                  setCheckpointDir
setJobDescription            setJobGroup
startTime                    stop
submitJob                    tachyonFolderName
textFile                     toString
union                        version
wholeTextFiles
```

`SparkContext` 有很多方法，但接下来我们使用最多的方法用于创建弹性分布式数据集（Resilient Distributed Dataset），简称 RDD。RDD 是 Spark 所提供的最基本的抽象，代表分布在集群中多台机器上的对象集合。Spark 有两种方法可以创建 RDD：

- 用 `SparkContext` 基于外部数据源创建 RDD，外部数据源包括 HDFS 上的文件、通过 JDBC 访问的数据库表或 Spark shell 中创建的本地对象集合；
- 在一个或多个已有 RDD 上执行转换操作来创建 RDD，这些转换操作包括记录过滤、对具有相同键值的记录做汇总、把多个 RDD 关联在一起等。

利用 RDD 可以很方便地描述对数据要进行的一串小而独立的计算步骤。

弹性分布数据集（RDD）

RDD 以分区（partition）的形式分布在集群中多个机器上，每个分区代表了数据集的一个子集。分区定义了 Spark 中数据的并行单位。Spark 框架并行处理多个分区，一个分区内的数据对象则是顺序处理。创建 RDD 最简单的方法是在本地对象集合上调用 `SparkContext` 的 `parallelize` 方法。

```
val rdd = sc.parallelize(Array(1, 2, 2, 4), 4)
...
rdd: org.apache.spark.rdd.RDD[Int] = ...
```

第一个参数代表待并行化的对象集合，第二个参数代表分区的个数。当要对一个分区内的对象进行计算时，Spark 从驱动程序进程里获取对象集合的一个子集。

要在分布式文件系统（比如 HDFS）上的文件或目录上创建 RDD，可以给 `textFile` 方法传入文件或目录的名称：

```
val rdd2 = sc.textFile("hdfs:///some/path.txt")
...
rdd2: org.apache.spark.rdd.RDD[String] = ...
```

如果 Spark 运行在本地模式，可以用 `textFile` 方法访问本地文件系统上的路径。如果输入是目录而不是单个文件，Spark 会把该目录下所有文件作为 RDD 的输入。最后请注意，实际上 Spark 并未将数据读取到客户端机器或集群内存中。当需要对分区内的对象进行计算时，Spark 才会读入输入文件的某个部分（也称“切片”），然后应用其他 RDD 定义的后续转换操作（过滤和汇总等）。

我们的记录关联数据存储在一个文本文件中，文件中每行代表一个样本。我们用 `SparkContext` 的 `textFile` 方法来得到 RDD 形式的数据引用：

```
val rawblocks = sc.textFile("linkage")
...
rawblocks: org.apache.spark.rdd.RDD[String] = ...
```

这几行代码有几点值得我们注意。第一，我们声明了一个名叫 `rawblocks` 的新变量。从

shell 中可以看出，rawblocks 变量的类型为 RDD[String]，而我们并没有在变量声明时指出变量类型。这个功能在 Scala 编程语言中称为*类型推断*，它为我们写代码时节省了许多键盘输入。Scala 会尽可能从上下文中分析出变量类型。在我们的示例中，Scala 会查找 SparkContext 对象 textFile 函数的返回值类型，发现该函数返回 RDD[String] 类型，于是就将 RDD[String] 类型赋给 rawblocks 变量

只要在 Scala 中定义新变量，必须在变量名称前加上 val 或 var。名称前带 val 的变量是不可变变量。一旦给不可变变量赋完初值，就不能改变它使它指向另一个值。而以 var 开头的变量则可以改变其指向，让它指向同一类型的不同对象。试试看如下代码的执行情况：

```
rawblocks = sc.textFile("linkage")
...
<console>: error: reassignment to val

var varblocks = sc.textFile("linkage")
varblocks = sc.textFile("linkage")
```

试图将关联数据重新赋给 rawblocks val 变量会报错，但重新给 varblocks var 变量赋值则没有问题。在 Scala REPL 中，对 val 变量有个例外，因为 Scala REPL 允许我们重新声明相同的不可变变量，请看代码：

```
val rawblocks = sc.textFile("linakge")
val rawblocks = sc.textFile("linkage")
```

示例中第二次声明 rawblocks val 变量并没有报错。这在常规 Scala 代码中是非法的，但在 shell 中却没有问题，本书的许多例子中会用到该功能。

REPL 与编译

除了交互式 shell，Spark 也支持编译程序。我们通常推荐使用 Maven 来编译程序和管理依赖关系。本书在 GitHub 的资料库的 simplesparkproject/ 目录下包含了一个完整的 Maven 工程，你可以用它作为开端。

现在你有两个选择：shell 和编译程序，但测试和构建数据处理程序时该选哪个呢？通常在初始阶段工作可能全部用 REPL 完成。REPL 可以加快原型开发，使迭代更快，让你的想法很快能看到结果。但随着程序越来越大，在一个文件中维护大量代码就变得很笨拙了，这时解释 Scala 程序也要消耗更多时间。如果数据量巨大，情况会更糟，经常会出现一个操作导致 Spark 应用崩溃或 SparkContext 不可用。如果发生这种情况，意味着所有的工作和输入的代码都丢失了。这时我们往往应该采用混合模式。最前面的开发工作在 REPL 里完成，随着代码逐渐成熟，将代码移到编译库里。可以在 spark-shell 中引用已编译好的 JAR，只要给 spark-shell 设置 --jars 参数即可。这样的话，如果使用得当，就不用频繁重新编译 JAR，同时 REPL 可以支持快速代码迭代和逐步成熟方式。

如何引用外部的 Java 和 Scala 类库呢？要编译引用了外部类库的代码，需要在工程的 Maven 配置文件（pom.xml）中指定所需的类库。要运行依赖外部类库的代码，需要在 Spark 进程中通过 `classpath` 将所需类库的 JAR 文件包含进来。为此一种好的做法是使用 Maven 来打包 JAR，使生成的 JAR 包含应用程序的所有依赖文件。接着在启动 shell 时通过 `--jars` 属性引用该 JAR。这种方法的优点是依赖只需要在 Maven 的 pom.xml 中指定一次即可。如何进行设置，请参考本书 GitHub 资料库 simplesparkproject/ 目录。

同时可以用 SPARK-5341 跟踪如下功能的开发进度：在 `spark-shell` 里直接指定 Maven 资料库，从 Maven 资料库获取的 JAR 自动设置在 Spark 的 `classpath` 里。

2.5 把数据从集群上获取到客户端

RDD 有许多方法，我们可以用这些方法从集群读取数据到客户端机器上的 Scala REPL 中。其中最简单的方法可能就是 `first` 了，该方法向客户端返回 RDD 的第一个元素：

```
rawblocks.first
...
res: String = "id_1","id_2","cmp_fname_c1","cmp_fname_c2",...
```

`first` 方法可用于对数据集做常规检查，但通常我们更想返回更多样例数据供客户端分析。如果知道 RDD 只包含少量记录，可以用 `collect` 方法向客户返回一个包含所有 RDD 内容的数组。因为我们还不知道这个关联数据集有多大，所以暂时不那么做了。

还可以用 `take` 方法，这个方法在 `first` 和 `collect` 之间做了一些折衷，可以向客户端返回一个包含指定数量记录的数组。我们来看看如何使用 `take` 方法获取记录关联数据集的前 10 行记录：

```
val head = rawblocks.take(10)
...
head: Array[String] = Array("id_1","id_2","cmp_fname_c1",...

head.length
...
res: Int = 10
```

动作

创建 RDD 的操作（action）并不会导致集群执行分布式计算。相反，RDD 只是定义了作为计算过程中间步骤的逻辑数据集。只有调用 RDD 上的 action 时分布式计算才会执行。举个例子，count 动作返回 RDD 中对象的个数：

```
rdd.count()
14/09/10 17:36:09 INFO SparkContext: Starting job: count ...
14/09/10 17:36:09 INFO SparkContext: Job finished: count ...
res0: Long = 4
```

collect 动作返回一个包含 RDD 中所有对象的 Array（数组）：

```
rdd.collect()
14/09/29 00:58:09 INFO SparkContext: Starting job: collect ...
14/09/29 00:58:09 INFO SparkContext: Job finished: collect ...
res2: Array[(Int, Int)] = Array((4,1), (1,1), (2,2))
```

动作不一定向本地进程返回结果。saveAsTextFile 动作将 RDD 的内容保存到持久化存储（比如 HDFS）上：

```
rdd.saveAsTextFile("hdfs:///user/ds/mynumbers")
14/09/29 00:38:47 INFO SparkContext: Starting job:
saveAsTextFile ...
14/09/29 00:38:49 INFO SparkContext: Job finished:
saveAsTextFile ...
```

该动作创建一个目录并为每个分区输出一个文件。切换到 Spark shell 外面的命令行，执行如下操作：

```
hadoop fs -ls /user/ds/mynumbers

-rw-r--r--   3 ds supergroup       0 2014-09-29 00:38 myfile.txt/_SUCCESS
-rw-r--r--   3 ds supergroup       4 2014-09-29 00:38 myfile.txt/part-00000
-rw-r--r--   3 ds supergroup       4 2014-09-29 00:38 myfile.txt/part-00001
```

记住，textFile 接受包含一个文本文件的目录作为输入，这意味将来的 Spark 作业可以把 mynumbers 作为其输入目录。

Scala REPL 返回的数据原始形式可能有点儿难以读懂，特别是对于包含了许多元素的数组更是如此。为了更容易读懂数组的内容，我们可以用 foreach 方法并结合 println 来打印出数组中的每个值，并且每一行打印一个值：

```
head.foreach(println)
...
"id_1","id_2","cmp_fname_c1","cmp_fname_c2","cmp_lname_c1","cmp_lname_c2",
  "cmp_sex","cmp_bd","cmp_bm","cmp_by","cmp_plz","is_match"
37291,53113,0.833333333333333,?,1,?,1,1,1,1,0,TRUE
39086,47614,1,?,1,?,1,1,1,1,1,TRUE
70031,70237,1,?,1,?,1,1,1,1,1,TRUE
```

```
84795,97439,1,?,1,?,1,1,1,1,1,TRUE
36950,42116,1,?,1,1,1,1,1,1,1,TRUE
42413,48491,1,?,1,?,1,1,1,1,1,TRUE
25965,64753,1,?,1,?,1,1,1,1,1,TRUE
49451,90407,1,?,1,?,1,1,1,1,0,TRUE
39932,40902,1,?,1,?,1,1,1,1,1,TRUE
```

本书经常用到 `foreach(println)` 模式。它是一个常见的函数式编程模式：把函数 `println` 作为参数传递给另一个函数以执行某个动作。用过 R 的数据科学家很熟悉这种编程风格。为了在处理向量和列表时避免循环，他们习惯用高阶函数，比如 `apply` 和 `lapply`。Scala 的集合与 R 的列表和向量类似，我们通常希望少用 `for` 循环，而在处理集合元素时采用高阶函数。

很快我们就发现数据有几个问题，这些问题必须在开始对数据分析前解决好。首先，CSV 文件有一个标题行需要过滤掉，以免影响后续分析。我们可以将标题行中出现的 `"id_1"` 字符串作为过滤条件，编写一个简单的 Scala 函数来测试一行记录中是否包含该字符串，代码如下：

```
def isHeader(line: String) = line.contains("id_1")
isHeader: (line: String)Boolean
```

和 Python 类似，Scala 声明函数用关键字 `def`。和 Python 不同，我们必须为函数指定参数类型：在示例中，我们指明 `line` 参数是 `String`。函数体部分调用 `String` 类的 `contains` 方法，用于测试字符串中是否出现 `"id_1"` 字符序列，等号后的部分都是函数体的内容。虽然我们必须指定 `line` 参数的类型，但是没必要指定函数的返回类型，原因在于 Scala 编译器能根据 `String` 类的信息和 `String` 类 `contains` 方法返回 `true` 或 `false` 这一事实来推断出函数的返回类型。

有时候我们希望能显式地指明函数返回类型，特别是碰到函数体很长、代码复杂并且包含多个 `return` 语句的情况。这时候，Scala 编译器不一定能推断出函数的返回类型。为了函数代码可读性更好，也可以指明函数的返回类型。这样他人在阅读代码的时候，就不必重新把整个函数读一遍了。可以紧跟在参数列表后面声明返回类型，示例如下：

```
def isHeader(line: String): Boolean = {
  line.contains("id_1")
}
isHeader: (line: String)Boolean
```

通过用 Scala 的 `Array` 类的 `filter` 方法打印出结果，可以在 `head` 数组上测试新编写的 Scala 函数：

```
head.filter(isHeader).foreach(println)
...
"id_1","id_2","cmp_fname_c1","cmp_fname_c2","cmp_lname_c1",...
```

看起来我们的 isHeader 方法没什么问题：通过 filter 方法将 isHeader 作用在 head 数组上，返回的唯一结果是标题行本身。当然我们其实想要的是所有非标题行。为了完成这个目标，Scala 有几种方法。第一个就是利用 Array 类的 filterNot 方法：

```
head.filterNot(isHeader).length
...
res: Int = 9
```

还可以利用 Scala 对匿名函数的支持，在 filter 函数里面对 isHeader 函数取非：

```
head.filter(x => !isHeader(x)).length
...
res: Int = 9
```

Scala 的匿名函数有点儿类似 Python 的 lambda 函数。在示例代码中我们定义了一个名为 x 的参数并把它传给 isHeader 函数，再对 isHeader 函数的返回值取非。请注意，样例代码中没必要指定 x 变量的类型信息，Scala 编译器能够根据 head 的类型是 Array[String] 推断出 x 是 String 类。

Scala 程序员最讨厌的就是键盘输入。因此 Scala 设计了许多小功能来减少输入，比如在匿名函数的定义中，为了定义匿名函数并给参数指定名称，只输入了字符 x=>。但像这么简单的匿名函数，甚至都没必要这么做：Scala 允许使用下划线（_）表示匿名函数的参数，因此我们可以少输入 4 个字符：

```
head.filter(!isHeader(_)).length
...
res: Int = 9
```

有时这种缩写语法使代码更易阅读，因为它省略了明显多余的标识符，但有时也会使代码更难懂。代码到底是更易懂还是更难懂，这就要靠我们自己判断了。

2.6　把代码从客户端发送到集群

刚才我们见识了 Scala 语言定义和运行函数的多种方式。我们执行的代码都作用在 head 数组中的数据上，这些数据都在客户端机器上。现在，我们打算把在 Spark 里把刚写好的代码应用到关联记录数据集 RDD rawblocks，该数据集在集群上的，记录有数百万条。

下面是一段示例代码，是不是觉得特别熟悉？

```
val noheader = rawblocks.filter(x => !isHeader(x))
```

用于过滤集群上整个数据集的语法和过滤本地机器上的 head 数组的语法一模一样。可以用 noheader 这个 RDD 来验证过滤规则是否正确：

```
noheader.first
...
res: String = 37291,53113,0.833333333333333,?,1,?,1,1,1,1,0,TRUE
```

这太强大了！它意味着我们可以先从集群采样得到小数据集，在小数据集上开发和调试数据处理代码，等一切就绪后把代码发送到集群上处理完整的数据集就可以了。最厉害的是，我们从头到尾都不用离开 shell 界面。除了 Spark，还真没有哪种工具能给你这种体验。

在后面几节中，我们将运用这种本地开发加测试和集群运算的方式，来展示更多处理和分析记录关联数据的技术。如果你现在想停下来喝口水，感叹一下 Spark 这个新世界的美妙，我们当然能理解。

2.7 用元组和case class对数据进行结构化

刚才 `head` 数组和 `noheader` RDD 中的记录都是逗号分隔的字符串。为了更容易分析这些数据，我们需要把字符串解析成结构化的格式，把不同字段转化成正确的数据类型，比如整数或双精度浮点数。

如果我们看看 `head` 数组的内容（包括标题行和记录本身），会发现数据有如下结构。

- 前两个字段是整数型 ID，代表记录中匹配的两个病人。
- 后面九个值是双精度浮点数，代表病人记录中不同字段（姓名、生日、地址）的匹配分值（可能包含数据丢失的情况）。
- 最后一个字段是布尔型（TRUE 或 FALSE），代表该行病人记录对是否匹配。

和 Python 一样，Scala 有内置 `tuple` 类型，可用于快速创建二元组、三元组和更多不同类型数值的集合，是一种表示记录的简单方法。现在我们解析每行记录，将其变为包含 4 个值的元组：第一个病人的整数 ID、第二个病人的整数 ID、包含九个双精度浮点数的一个数组（`NaN` 值代表数值缺失）和表示是否匹配的布尔型字段。

与 Python 不同，Scala 没有内置方法解析逗号分隔的字符串，因此我们还得干点儿体力活。我们可以用 Scala REPL 试试我们的解析代码。首先从 `head` 数组中取出一条记录：

```
val line = head(5)
val pieces = line.split(',')
...
pieces: Array[String] = Array(36950, 42116, 1, ?,...
```

注意访问 `head` 数组元素时用圆括号而不是方括号。Scala 语言访问数组元素是函数调用，不是什么特殊操作符。Scala 允许在类里定义一个特殊函数 `apply`，当把对象当作函数处理的时候，这个 `apply` 函数就会被调用，所以 `head(5)` 等同于 `head.apply(5)`。

我们用 Java String 类的 split 函数把 line 中不同部分拆开，并且返回 Array[String] 类型的数组 pieces。现在用 Scala 的类型转化函数把 pieces 的单个元素转换成合适的类型：

```
val id1 = pieces(0).toInt
val id2 = pieces(1).toInt
val matched = pieces(11).toBoolean
```

只要我们知道相应的 toXYZ 转换函数，转换变量 id1、id2 和布尔类型的变量 matched 就简单了。不像我们之前用到的 contains 方法和 split 方法，toInt 和 toBoolean 方法并不是由 Java 的 String 类定义的，而是由 Scala 的 StringOps 类定义的。这里用到了 Scala 更为强大（也可以说有点儿危险）的特性：*隐式类型转换*。隐式类型转换的工作原理如下：当调用 Scala 对象的方法时，如果在定义该对象的类中找不到方法定义，Scala 编译器就将该对象转换成有相应方法定义的类的实例。在我们的示例中，编译器会发现 Java 的 String 类没有定义 toInt 方法而 StringOps 有，既然 StringOps 类定义了 toInt 方法，那么就可以将 String 类的实例转换成 StringOps 类的实例。这时编译器就悄悄地把 String 对象转换成 StringOps 对象，然后在新对象上调用 toInt 方法。

Scala 类库的开发人员（包括 Spark 核心开发人员）非常喜欢隐式类型转换。有了隐含类型转换，他们就可以增强像 String 这样的核心类的功能，而如果没有隐式类型转换，String 类是没法修改的。但对于这些工具的用户而言，隐式类型转换则有好有坏，因为它使得人们很难搞清楚一个方法到底是在哪儿定义的。不管怎样，我们的示例中将多次出现隐式类型转换，所以还是早点儿习惯它为好。

我们还需要转换双精度浮点数类型的九个匹配分值字段。要一次完成全部转换，可以先用 Scala Array 类的 slice 方法提取一部分数组元素，然后调用高阶函数 map 把 slice 中每个元素的类型从 String 转换为 Double：

```
val rawscores = pieces.slice(2, 11)
rawscores.map(s => s.toDouble)
...
java.lang.NumberFormatException: For input string: "?"
  at sun.misc.FloatingDecimal.readJavaFormatString(FloatingDecimal.java:1241)
  at java.lang.Double.parseDouble(Double.java:540)
  ...
```

哎呀，忘了 rawscores 数组可能有 ? 了，StringOps 的 toDouble 方法不知道怎样把 ? 转成 Double。我们来写一个函数，它在遇到 ? 时返回 NaN 值，然后在 rawscores 数组上运行这个函数：

```
def toDouble(s: String) = {
  if ("?".equals(s)) Double.NaN else s.toDouble
}
val scores = rawscores.map(toDouble)
scores: Array[Double] = Array(1.0, NaN, 1.0, 1.0, ...
```

看，现在好多了！接着把所有解析代码合并到一个函数，在一个元组中返回所有解析好的值：

```
def parse(line: String) = {
  val pieces = line.split(',')
  val id1 = pieces(0).toInt
  val id2 = pieces(1).toInt
  val scores = pieces.slice(2, 11).map(toDouble)
  val matched = pieces(11).toBoolean
  (id1, id2, scores, matched)
}
val tup = parse(line)
```

从元组中获取单个字段的值，可以用下标函数，从 `_1` 开始，或者用 `productElement` 方法，它是从 `0` 开始计数的。也可以用 `productArity` 方法得到元组的大小：

```
tup._1
tup.productElement(0)
tup.productArity
```

Scala 创建元组非常简单方便，但通过下标而不是有意义的名称来访问记录元素会让代码很难理解。其实我们希望能创建一个简单的记录类型，它可以根据名称而不是用下标访问字段。幸运的是，Scala 提供了这样的语法，可以方便地创建这种记录，这就是 case class。case class 是不可变类的一种简单类型，它非常好用，内置了所有 Java 类的基本方法，比如 `toString`、`equals` 和 `hashCode`。我们来试试为记录关联数据定义一个 case class：

```
case class MatchData(id1: Int, id2: Int,
  scores: Array[Double], matched: Boolean)
```

现在修改 `parse` 方法以返回 `MatchData` 实例，这个实例是 case class 而不再是元组：

```
def parse(line: String) = {
  val pieces = line.split(',')
  val id1 = pieces(0).toInt
  val id2 = pieces(1).toInt
  val scores = pieces.slice(2, 11).map(toDouble)
  val matched = pieces(11).toBoolean
  MatchData(id1, id2, scores, matched)
}
val md = parse(line)
```

这里要注意两点：一，创建 case class 时没必要在 `MatchData` 前写上关键字 `new`（再次说明 Scala 开发人员非常讨厌敲键盘）；二，`MatchData` 类有个内置的 `toString` 方法实现，除了 `scores` 数组字段外，这个方法在其他字段上的表现都还不错。

现在通过名字来访问 `MatchData` 的字段：

```
md.matched
md.id1
```

现在完成了在单条记录上测试解析函数，接下来把它用在 head 数组的所有元素上（标题行除外）：

```
val mds = head.filter(x => !isHeader(x)).map(x => parse(x))
```

很好，通过了。现在将解析函数用于集群数据，在 noheader RDD 上调用 map 函数：

```
val parsed = noheader.map(line => parse(line))
```

记住：和我们本地生成的 mds 数组不同，parse 函数并没有实际应用到集群数据上。当在 parsed 这个 RDD 上执行某个需要输出的调用时，就会用 parse 函数把 noheader RDD 的每个 String 转换成 MatchData 类的实例。如果在 parsed RDD 上执行另一个调用以产生不同输出，parse 函数会在输入数据上再执行一遍。

这没有充分利用集群资源。数据一旦解析好，我们想以解析格式把数据存到集群上，这样就不需要每次遇到新问题时都重新解析。Spark 支持这种使用场景，通过在实例上调用 cache 方法，可以指示在内存里缓存某个 RDD。现在用 parsed 这个 RDD 实验一下：

```
parsed.cache()
```

缓存

虽然默认情况下 RDD 的内容是临时的，但 Spark 提供了在 RDD 中持久化数据的机制。第一次调用动作并计算出 RDD 内容后，RDD 的内容可以存储在集群的内存或磁盘上。这样下一次需要调用依赖该 RDD 的动作时，就不需要从依赖关系中重新计算 RDD，数据可以从缓存分区中直接返回：

```
cached.cache()
cached.count()
cached.take(10)
```

在上述代码中，cache 方法调用指示在下次计算 RDD 后，要把 RDD 存储起来。调用 count 会导致第一次计算 RDD。采取（take）这个动作返回一个本地的 Array，包含 RDD 的前 10 个元素。但调用 take 时，访问的是 cached 已经缓存好的元素，而不是从 cached 的依赖关系中重新计算出来的。

Spark 为持久化 RDD 定义了几种不同的机制，用不同的 StorageLevel 值表示。rdd.cache() 是 rdd.persist(StorageLevel.MEMORY) 的简写，它将 RDD 存储为未序列化的 Java 对象。当 Spark 估计内存不够存放一个分区时，它干脆就不在内存中存放该分区，这样在下次需要时就必须重新计算。在对象需要频繁访问或低延访问时适合使用 StorageLevel.MEMORY，因为它可以避免序列化的开销。相比其他选项，StorageLevel.MEMORY 的问题是要占用更大的内存空间。另外，大量小对象会对 Java 的垃圾回收造成压力，会导致程序停顿和常见的速度缓慢问题。

Spark 也提供了 MEMORY_SER 的存储级别，用于在内存中分配大字节缓冲区以存储 RDD 序列化内容。如果使用得当（稍后会详细介绍），序列化数据占用的空间比未经序列化的数据占用的空间往往要少两到五倍。

Spark 也可以用磁盘来缓存 RDD。存储级别 MEMORY_AND_DISK 和 MEMORY_AND_DISK_SER 分别类似于 MEMORY 和 MEMORY_SER。对于 MEMORY 和 MEMORY_SER，如果一个分区在内存里放不下，整个分区都不会放在内存。对于 MEMORY_AND_DISK 和 MEMORY_AND_DISK_SER，如果分区在内存里放不下，Spark 会将其溢写到磁盘上。

什么时候该缓存数据是门艺术，这通常需要对空间和速度进行权衡，垃圾回收开销的问题也会时不时让情况更复杂。一般情况下，如果多个动作需要用到某个 RDD，而它的计算代价又很高，那么就应该把这个 RDD 缓存起来。

2.8 聚合

到目前为止，本章主要讲述了用 Scala 和 Spark 处理数据的方法，这些方法对本地数据和集群数据是相似的。本节我们来看看 Scala 和 Spark API 的一些不同之处，特别是在数据分组和聚合方面。大多数不同之处在于效率：相比数据在单台机器的内存中就能容纳的情况，大规模的数据集分布在多台机器上，对其进行聚合时，我们更为担心数据传输的效率。

为了说明这种差异，我们用 Spark 分别在本地客户端和集群上对 MatchData 执行简单的聚合操作，目的是计算匹配和不匹配的记录数量。对于 mds 数组中的本地 MatchData 记录，我们用 groupBy 方法来创建一个 Scala Map[Boolean, Array[MatchData]]，其中键值基于 MatchData 类的字段 matched：

```
val grouped = mds.groupBy(md => md.matched)
```

得到 grouped 变量中的值以后，就可以通过在 grouped 上调用 mapValues 方法得到计数。mapValues 方法和 map 方法类似，但作用在 Map 对象中的值并得出每个数组的大小：

```
grouped.mapValues(x => x.size).foreach(println)
```

就像我们看到的一样，本地数据中的条目都是匹配的，因此 map 返回的唯一条目是元组 (true,9)。当然，本地数据只是整个记录关联数据集中的一部分，当这个分组操作运行在整个数据上时，我们期望能找到很多不匹配的记录。

对集群数据进行聚合时，一定要时刻记住我们分析的数据是存放在多台机器上的，并且聚合需要通过连接机器的网络来移动数据。跨网络移动数据需要许多计算资源，包括确定每条记录要传到哪些服务器、数据序列化、数据压缩，通过网络发送数据、解压缩，接着序列化结果，最后在聚合后的数据上执行运算。为了提高速度，我们需要尽可能少地移动数据。在聚合前能过滤掉的数据越多，就能越快得到问题的答案。

2.9 创建直方图

先来试试创建一个简单的直方图，用它来算一下 parsed 中的 MatchData 记录有多少 matched 字段值为 true 或 false。幸运的是 RDD[T] 类已经定义了一个名为 countByValue 的动作，该动作对于计数类运算效率非常高，它向客户端返回 Map[T,Long] 类型的结果。对 MatchData 记录中的 matched 字段映射调用 countByValue 会执行一个 Spark 作业，并向客户端返回结果：

```
val matchCounts = parsed.map(md => md.matched).countByValue()
```

在 Spark 客户端中创建直方图或进行其他类似的值分组时，特别是在涉及的类型变量有很多值的情况下，我们很想用不同方式对直方图进行排序，比如按键的字母顺序排序或按值的个数排序，而且排序可以是升序也可以是降序。虽然 matchCounts 这个 Map 包含的键只有 true 和 false，但我们还是想简单看一下怎样以不同方式对内容进行排序。

Scala 的 Map 类没有提供根据内容的键或值排序的方法，但我们可以将 Map 转换成 Scala 的 Seq 类型，而 Seq 类支持排序。Scala 的 Seq 类和 Java 的 List 接口类似，都是可迭代集合，即具有确定的长度并且可以根据下标来查找值：

```
val matchCountsSeq = matchCounts.toSeq
```

Scala 集合

Scala 集合类库很庞大，包括 list、set、map 和 array。利用 toList、toSet 和 toArray 方法，各种集合类型可以方便地相互转换。

matchCountsSeq 序列由 (String, Long) 类型的元素组成，我们可以用 sortBy 方法控制用哪个指标排序：

```
matchCountsSeq.sortBy(_._1).foreach(println)
...
(false,5728201)
(true,20931)

matchCountsSeq.sortBy(_._2).foreach(println)
...
(true,20931)
(false,5728201)
```

默认情况下，sortBy 函数对数值按升序排序，但很多情况下降序排序对直方图数据更有用。通过在序列上调用 reverse 方法，在打印之前可以改变排序方式：

```
matchCountsSeq.sortBy(_._2).reverse.foreach(println)
...
(false,5728201)
(true,20931)
```

看看整个数据集的匹配计数情况，我们发现匹配的记录数和不匹配的记录数差别很大。只有不到 0.4% 的输入对是匹配的。这种差异对记录关联模型影响是重大的：很可能我们提出的匹配分值函数的误报率很高（也就是许多记录对看起来是匹配的，但实际上不匹配）。

2.10 连续变量的概要统计

对类别变量基数相对小的数据，非常适合用 Spark 的 `countByValue` 动作创建直方图。但对连续变量，比如病人记录字段匹配分数，我们想快速得到其分布的基本统计信息，比如均值、标准差和极值（比如最大值和最小值）。

对 `RDD[Double]` 的实例，通过隐式类型转换，Spark API 提供了额外的动作，就像为 `String` 类提供的 `toInt` 方法一样。如果知道如何处理 RDD 所含值的额外信息，可以通过隐式动作对 RDD 功能做有用扩展。

> **Pair RDD**
>
> 除了 `RDD[Double]` 的隐式动作，Spark 支持 `RDD[Tuple2[K, V]]` 类型隐式类型转换，不但提供根据每个键来汇总的 `groupByKey` 和 `reduceByKey` 方法，而且提供联结键类型相同的多个 RDD 的方法。

`stats` 是 `RDD[Double]` 的一个隐式动作，它提供了我们渴望的 RDD 值概要统计信息。我们用它在 `parsed` RDD 中 `MatchData` 记录的 `scores` 数组的第一个值上实验一下：

```
parsed.map(md => md.scores(0)).stats()
StatCounter = (count: 5749132, mean: NaN, stdev: NaN, max: NaN, min: NaN)
```

糟糕的是，数组中用作占位符的缺失 `NaN` 值使 Spark 的概要统计信息出了错。更糟糕的是，Spark 目前并没有提供很好的方式帮我们排除缺失值并 / 或计算缺失值个数。因此我们必须使用 Java `Double` 类的 `isNaN` 函数手动过滤：

```
import java.lang.Double.isNaN
parsed.map(md => md.scores(0)).filter(!isNaN(_)).stats()
StatCounter = (count: 5748125, mean: 0.7129, stdev: 0.3887, max: 1.0, min: 0.0)
```

只要愿意，用这种方式可以得到 `scores` 数组值的所有统计信息：用 Scala 的 `Range` 结构创建一个循环，遍历每个下标并计算该列的统计信息：

```
val stats = (0 until 9).map(i => {
  parsed.map(md => md.scores(i)).filter(!isNaN(_)).stats()
})

stats(1)
...
StatCounter = (count: 103698, mean: 0.9000, stdev: 0.2713, max: 1.0, min: 0.0)
```

```
stats(8)
...
StatCounter = (count: 5736289, mean: 0.0055, stdev: 0.0741, max: 1.0, min: 0.0)
```

2.11 为计算概要信息创建可重用的代码

虽然这个方法能完成工作，但很低效：为了得到所有统计信息，必须重复处理 parsed RDD 的所有记录 9 次。即使能通过内存缓存中间结果以节省处理时间，随着数据量越来越大，重复处理所有数据的开销也将越来越高。用 Spark 开发分布式算法时，想办法尽可能减少遍历数据的次数来得到所有答案是值得的。对于我们的例子，我们来想办法写一个函数，输入一个 RDD[Array[Double]]，返回一个数组，其中包含每个指标对应的缺失值个数和一个 StatCounter 对象。StatCounter 对象包含了每个指标除去缺失值后的概要统计信息。

只要分析过的任务可能重复出现，就值得花些时间改善代码，使其他分析人员更容易使用我们的方案。为此我们拆分 Scala 代码，把它放进一个单独的文件，然后在测试和验证的时候通过 Spark shell 加载这个文件即可。如果知道代码可以正确运行，还可以把这个文件共享给他人。

此时代码的复杂度会有一个飞跃。现在我们不再用只有一两行的方法和函数，而是需要创建 Scala 类和 API，这意味着要用到更复杂的语言特性。

对缺失值分析而言，我们的第一个任务就是写一个类似于 Spark StatCounter 类的东西，以正确处理缺失值。在客户端机器的一个独立的 shell 里，打开一个文件并命名为 StatsWithMissing.scala，然后把如下的类定义复制到这个文件里。我们先看代码然后再看每个字段和方法：

```
import org.apache.spark.util.StatCounter

class NAStatCounter extends Serializable {
  val stats: StatCounter = new StatCounter()
  var missing: Long = 0

  def add(x: Double): NAStatCounter = {
    if (java.lang.Double.isNaN(x)) {
      missing += 1
    } else{
      stats.merge(x)
    }
    this
  }

  def merge(other: NAStatCounter): NAStatCounter = {
    stats.merge(other.stats)
```

```
    missing += other.missing
    this
  }

  override def toString = {
    "stats: " + stats.toString + " NaN: " + missing
  }
}

object NAStatCounter extends Serializable {
  def apply(x: Double) = new NAStatCounter().add(x)
}
```

NAStatCounter 类有两个成员变量：StatCounter 类型的不可变量 stats 和 Long 类型的可变变量 missing。注意我们把类标记为 Serializable，因为我们要在 Spark RDD 内部使用该类的实例。如果 Spark 不能持久化其内部的数据，我们的作业会失败。

类的第一个方法 add 用于将一个新 Double 值加到由 NAStatCounter 跟踪的统计信息中，如果 Double 值是 NaN，就表明值是缺失的，如果不是 NaN，就把值加到底层的 StatCounter 上。方法 merge 向当前实例加入了统计信息，它由另一个 NAStatCounter 实例跟踪。这两个方法都返回 this，这样方便它们链式串联起来。

最后我们覆盖了 NAStatCounter 的 toString 方法，这样就可以轻松地在 Spark shell 中打印出 NAStatCounter 的内容。在 Scala 语言中，覆盖父类的方法必须要在方法定义之前加上 override 关键字。相比 Java，Scala 提供的方法覆盖模式要多得多，关键字 override 帮助 Scala 跟踪对任何类该使用哪个方法定义。

和类定义一起，我们为 NAStatCounter 定义了一个伴生对象（companion object）。Scala 的 object 关键字用于声明一个单例对象，该对象为类提供助手方法，这类似于 Java 类的 static 方法定义。在我们的示例中，伴生对象提供的 apply 方法创建了 NAStatCounter 类的实例，并把一个给定的 Double 值加到实例里然后返回实例。在 Scala 中，apply 方法有一种特殊语法糖，它使我们调用该方法而不用多敲代码；比如如下两行代码的功能完全相同：

```
val nastats = NAStatCounter.apply(17.29)
val nastats = NAStatCounter(17.29)
```

NAStatCounter 类定义好了，关闭并保存 StatsWithMissing.scala 文件，然后用 load 命令把它加载到 Spark shell 里：

```
:load StatsWithMissing.scala
...
Loading StatsWithMissing.scala ...
import org.apache.spark.util.StatCounter
defined class NAStatCounter
```

```
defined module NAStatCounter
warning: previously defined class NAStatCounter is not a companion to object
NAStatCounter. Companions must be defined together; you may wish to use
:paste mode for this.
```

警告提示我们伴生对象在 shell 使用的增量式编译模式下是不合法的。但我们可以验证几个例子能正确运行：

```
val nas1 = NAStatCounter(10.0)
nas1.add(2.1)
val nas2 = NAStatCounter(Double.NaN)
nas1.merge(nas2)
```

现在用新的 NAStatCounter 类来处理 parsed RDD 中 MatchData 记录的匹配分数。每个 MatchData 实例包含一个 Array[Double] 类型的分值数组。对数组的每一项，我们都想有一个 NAStatCounter 实例来追踪数组下标对应的值有多少个是 NaN，同时也追踪除去缺失值后的常规分布的统计信息。给定一个值的数组，我们可以用 map 函数来创建一组 NAStatCounter 对象：

```
val arr = Array(1.0, Double.NaN, 17.29)
val nas = arr.map(d => NAStatCounter(d))
```

RDD 中每条记录都有自己的 Array[Double]，我们可以把它转换成另一个 RDD，新 RDD 的每条记录是一个 Array[NAStatCounter]。现在我们继续把这个方法用到集群上的 parsed RDD：

```
val nasRDD = parsed.map(md => {
  md.scores.map(d => NAStatCounter(d))
})
```

我们需要有一种简单的方式把多个 Array[NAStatCounter] 实例聚合到一个 Array[NAStatCounter] 中。可以用 zip 方法把两个具有相同长度的数组组合在一起生成一个新 Array，新 Array 的元素是由原来两个数组中具有相同下标的两个元素组成的元素对：

```
val nas1 = Array(1.0, Double.NaN).map(d => NAStatCounter(d))
val nas2 = Array(Double.NaN, 2.0).map(d => NAStatCounter(d))
val merged = nas1.zip(nas2).map(p => p._1.merge(p._2))
```

我们甚至可以用 Scala 的 case 语法，将合并后的数组中的元素对拆成有良好命名的变量，而不用 Tuple2 类中的 _1 和 _2 这种晦涩难懂的方法：

```
val merged = nas1.zip(nas2).map { case (a, b) => a.merge(b) }
```

要在 Scala 集合的所有记录上执行相同的 merge 操作，可以使用 reduce 函数。reduce 函数的输入是一个关联函数，该函数把两个 T 类型的参数映射为一个 T 类型的返回值。reduce 函数一遍又一遍地将关联函数应用到集合的所有元素，这样就把所有值都合并在一起了。因为之前写的合并逻辑是关联性的，所以我们可以把它作为 reduce 函数的输入并应用到

Array[NAStatCounter] 类型值的集合上。

```
val nas = List(nas1, nas2)
val merged = nas.reduce((n1, n2) => {
  n1.zip(n2).map { case (a, b) => a.merge(b) }
})
```

RDD 类同样有一个 reduce 动作，它和我们刚才用到的 Scala 集合上的 reduce 方法类似，只是作用的对象为分布在集群上的所有数据。Spark 代码和我们刚为 List[Array[NAStatCounter]] 写的一模一样：

```
val reduced = nasRDD.reduce((n1, n2) => {
  n1.zip(n2).map { case (a, b) => a.merge(b) }
})
reduced.foreach(println)
...
stats: (count: 5748125, mean: 0.7129, stdev: 0.3887,
max: 1.0, min: 0.0) NaN: 1007
stats: (count: 103698, mean: 0.9000, stdev: 0.2713,
max: 1.0, min: 0.0) NaN: 5645434
stats: (count: 5749132, mean: 0.3156, stdev: 0.3342, max: 1.0, min: 0.0) NaN: 0
stats: (count: 2464, mean: 0.3184, stdev: 0.3684,
max: 1.0, min: 0.0) NaN: 5746668
stats: (count: 5749132, mean: 0.9550, stdev: 0.2073, max: 1.0, min: 0.0) NaN: 0
stats: (count: 5748337, mean: 0.2244, stdev: 0.4172, max: 1.0, min: 0.0) NaN: 795
stats: (count: 5748337, mean: 0.4888, stdev: 0.4998, max: 1.0, min: 0.0) NaN: 795
stats: (count: 5748337, mean: 0.2227, stdev: 0.4160, max: 1.0, min: 0.0) NaN: 795
stats: (count: 5736289, mean: 0.0055, stdev: 0.0741,
max: 1.0, min: 0.0) NaN: 12843
```

让我们把缺失值分析代码打包为一个函数，放在 StatsWithMissing.scala 文件里。编辑该文件并加入如下代码，它就可以为任何 RDD[Array[Double]] 计算所需的统计信息：

```
import org.apache.spark.rdd.RDD

def statsWithMissing(rdd: RDD[Array[Double]]): Array[NAStatCounter] = {
  val nastats = rdd.mapPartitions((iter: Iterator[Array[Double]]) => {
    val nas: Array[NAStatCounter] = iter.next().map(d => NAStatCounter(d))
    iter.foreach(arr => {
      nas.zip(arr).foreach { case (n, d) => n.add(d) }
    })
    Iterator(nas)
  })
  nastats.reduce((n1, n2) => {
    n1.zip(n2).map { case (a, b) => a.merge(b) }
  })
}
```

注意，在对输入 RDD 的每条记录生成 Array[NAStatCounter] 时，并不是调用 map 函数，而是调用更高级的 mapPartitions 函数。mapPartitions 函数只用一个迭代器 Iterator[Array[Double]] 处理输入 RDD[Array[Double]] 的一个分区中的所有记录。这样只

要为每个数据分区创建一个 Array[NAStatCounter]，并用迭代器返回的 Array[Double] 类型的值来更新 Array[NAStatCounter] 实例的状态就好了，这种实现方式的效率更高。我们实现的 statsWithMissing 方法现在真的和 Spark 开发人员实现的 RDD[Double] 的 stats 方法差不多一样了。

2.12 变量的选择和评分简介

有了 statsWithMissing 函数，我们就可以分析 parsed RDD 中匹配和不匹配记录的匹配分值数组的分布差异了。

```
val statsm = statsWithMissing(parsed.filter(_.matched).map(_.scores))
val statsn = statsWithMissing(parsed.filter(!_.matched).map(_.scores))
```

statsm 和 statsn 这两个数组结构相同，但对应不同的数据子集：statsm 包含匹配记录匹配分值数组的概要统计信息，而 statsn 对应不匹配记录分值数组的概要统计信息。对匹配和不匹配记录列的值做简单差异分析，有助于我们提出一个评分函数，该评分函数可以根据匹配得分把匹配记录和不匹配记录清楚地分开：

```
statsm.zip(statsn).map { case(m, n) =>
  (m.missing + n.missing, m.stats.mean - n.stats.mean)
}.foreach(println)
...
((1007, 0.2854529057466858)
((5645434,0.09104268062279874)
((0,0.6838772482597568)
((5746668,0.8064147192926266)
((0,0.03240818525033484)
((795,0.7754423117834044)
((795,0.5109496938298719)
((795,0.7762059675300523)
((12843,0.9563812499852178)
```

一个好特征有两个属性：第一，对匹配记录和不匹配记录它的值往往差别很大（因此均值的差异也很大）；第二，在数据中出现的频率高，这样我们才能指望它在任何一对记录里都有值。如果按这个指标来看，特征 1 作用不大：它缺失的情况很多，并且对匹配记录和非匹配记录它的均值差别也相对小，对从 0 到 1 的范围来讲，只有 0.09。特征 4 也不是特别有帮助：尽管它没有缺失情况，但对匹配记录和非匹配记录它的均值差别只有区区 0.03。

相反，特征 5 和特征 7 就特别好：它们基本上对每对记录都有值，并且对匹配记录和非匹配记录它的均值差别非常大（均超过 0.77）。特征 2、特征 6 和特征 8 看起来也有用：它们在数据集中通常都有值，匹配记录和非匹配记录的均值差别也不小。

特征 0 和特征 3 就有点儿处在中间地带：特征 0 的区分度不太好（匹配记录和非匹配记录

的均值差别只有 0.28），但它在记录对中通常都有值；特征 3 匹配记录和非匹配记录的均值差别大但却几乎总是缺失。根据这个数据很难清晰界定什么情况下我们该把这两个特征加入到我们的模型中。

现在我们用一个简单的评分模型，该模型把记录对的相似度排序。相似度的计算为特征 2、5、6、7 和 8 的值相加，这些特征明显是好特征。少数记录中这几个特征有缺失的情况，对于这些记录的相加结果我们以 0 来代替 NaN。我们想大体了解一下我们的简单模型表现如何，方法如下：创建分数和匹配值 RDD 并评估在不同阈值下匹配记录和不匹配记录的分数差别：

```
def naz(d: Double) = if (Double.NaN.equals(d)) 0.0 else d
case class Scored(md: MatchData, score: Double)
val ct = parsed.map(md => {
  val score = Array(2, 5, 6, 7, 8).map(i => naz(md.scores(i))).sum
  Scored(md, score)
})
```

过滤阈值为 4.0，这个值很高，意味着 5 个特征的平均值是 0.8。我们过滤掉了几乎所有不匹配的记录，同时保留了超过 90% 的匹配记录：

```
ct.filter(s => s.score >= 4.0).map(s => s.md.matched).countByValue()
...
Map(false -> 637, true -> 20871)
```

使用一个较低的阈值 2.0，我们可以捕捉所有已知的匹配记录，但代价是误报率高。

```
ct.filter(s => s.score >= 2.0).map(s => s.md.matched).countByValue()
...
Map(false -> 596414, true -> 20931)
```

尽管误报次数有点儿多，这个更宽松的过滤条件仍然过滤掉了 90% 的不匹配记录，而且保留了每个真正的匹配记录。虽然这已经很好了，但还是有改进的余地。请读者试一试，看能否找到一个更好的评分函数。这个评分可使用 scores 数组中的其他值（包括缺失的和非缺失的），它能区分出每个匹配的记录，但误报次数少于 100。

2.13　小结

如果本章是你第一次用 Scala 和 Spark 做数据准备和分析，我们希望通过本章的学习，你对这些工具提供的强大支持已经有所了解了。如果你已经用过一段时间 Scala 和 Spark，我们希望你把本章的内容介绍给朋友和同事，以便他们也可以了解 Scala 和 Spark 的强大。

本章的目的是为你提供足够的 Scala 知识，以便理解和完成本书后续的示例。如果你习惯通过实例来学习，那你得继续看看后面几章，届时将介绍 Spark 的机器学习库 MLlib。

随着你能熟练地用 Spark 和 Scala 做数据分析，会慢慢地想自己构建工具和类库，从而帮助其他分析人员和数据科学家用 Spark 解决问题。这时看看其他 Scala 书会对你的开发有所帮助，这些书包括 Dean Wampler 所著的 *Programming Scala, 2nd Edition*[1] 和 Alvin Alexander 所著的 *Scala Cookbook*（这两本书均由 O'Reilly 出版社出版）。

注 1：本书已经由人民邮电出版社图灵公司引进，近期将出版。——编者注

第3章

音乐推荐和Audioscrobbler数据集

作者：Sean Owen

偏好是无法度量的。

经常有人问起我的职业。“数据科学”或“机器学习”固然听起来很高端，但常常把对方搞得一头雾水。发生这种情况很正常，即使数据科学家自己也很难把数据科学说清楚。数据科学就是存储大量数据，对数据进行计算，然后进行预测吗？通常这时我会直接举个例子来帮助提问者搞清楚我到底是做什么的：

“嗯，你在亚马逊买了书以后，它会向你推荐类似的书，对吗？对，就是这个意思，其实它就用到了数据科学！”

从经验上来讲，推荐引擎大体上属于大规模机器学习。大家对此都了解，而且大部分人在亚马逊上都见过。从社交网络到视频网站，再到在线零售，都用到了推荐引擎，大家都知道推荐引擎。实际应用中的推荐引擎我们也能直接看到。虽然我们知道 Spotify 上是计算机在挑选播放的歌曲，但我们可不一定知道 Gmail 系统可以判断收件箱里的邮件是不是垃圾邮件。

相比其他的机器学习算法，推荐引擎的输出更直观，更容易理解。有时这甚至会让人很激动。尽管我们都认为每个人的音乐喜好都非常个性化，并且也很难解释这种现象，但是推荐引擎却很擅长推荐一些让人喜爱的歌曲，这些歌曲连我们自己都不知道会喜欢。

最后，在推荐引擎应用比较广泛的领域，比如音乐和电影，要解释为什么推荐的音乐和一个人以前听过的音乐相吻合，这是相对比较容易的。但对某些聚类和分类算法来说，情况就不是这样了。比如，支持向量机分类器其实就是一组系数，用这个分类器进行预测时，即使是业内人士，也很难解释这些系数的意义。

现在该开始介绍接下来的三章了，这三章讲述 Spark 中主要的机器学习算法。其中一章围绕推荐引擎展开，主要介绍音乐推荐。在随后的章节中我们先介绍 Spark 和 MLlib 的实际应用，接着介绍一些机器学习的基本思想，这样的阐述方式读者接受起来比较容易。

3.1 数据集

本章示例使用 Audioscrobbler 公开发布的一个数据集。Audioscrobbler 是 last.fm 的第一个音乐推荐系统。last.fm 创建于 2002 年，是最早的互联网流媒体广播站点之一。Audioscrobbler 提供了开放的“scrobbling”API，“scrobbling”可以记录听众播放过哪些艺术家的歌曲。last.fm 使用这些音乐播放记录构建了一个强大的音乐推荐引擎。由于第三方应用和网站可以把音乐播放数据反馈给这个推荐引擎，这个推荐引擎系统覆盖了数百万的用户。

在 last.fm 的年代，推荐引擎方面的研究大多局限于评分类数据。换句话说，人们常常把推荐引擎看成处理“Bob 给 Prince 的评价是 3 星半”这类输入数据的工具。

Audioscrobbler 数据集有些特别，因为它只记录了播放数据，如“Bob 播放了一首 Prince 的歌曲”。播放记录所包含的信息比评分要少。仅仅凭 Bob 播放过某歌曲这一信息并不能说明他真的喜欢这首歌。有时候我们会随便打开一首歌，甚至是整张专辑，然后就离开了房间，可能都不关心歌到底是谁唱的。

然而，虽然人们经常听音乐，但却很少给音乐评分。因此 Audioscrobbler 数据集要大得多，它覆盖了更多的用户和艺术家，也包含了更多的总体信息，虽然单条记录的信息比较少。这种类型的数据通常被称为*隐式反馈数据*，因为用户和艺术家的关系是通过其他行动隐含体现出来的，而不是通过显式的评分或点赞得到的。

2005 年 last.fm 发布了该数据集的一个版本，读者可以在网上下载到压缩的归档文件（http://www-etud.iro.umontreal.ca/~bergstrj/audioscrobbler_data.html）。下载归档文件后，你会发现里面有几个文件。主要的数据集在文件 user_artist_data.txt 中，它包含 141 000 个用户和 160 万个艺术家，记录了约 2420 万条用户播放艺术家歌曲的信息，其中包括播放次数信息。

数据集在 artist_data.txt 文件中给出了每个艺术家的 ID 和对应的名字。请注意，记录播放信息时，客户端应用提交的是艺术家的名字。名字如果有拼写错误，或使用了非标准的名称，事后才能被发现。比如，“The Smiths”“Smiths, The”和“the smiths”看似代表不同

艺术家的 ID，但它们其实明显是指同一个艺术家。因此，为了将拼写错误的艺术家 ID 或 ID 变体对应到该艺术家的规范 ID，数据集提供了 artist_alias.txt 文件。

3.2 交替最小二乘推荐算法

现在我们要给这个隐式反馈数据选择一个合适的推荐算法。这个数据集只记录了用户和歌曲之间的交互情况。除了艺术家名字外，数据集没有包含用户的信息，也没有提供歌手的其他任何信息。我们要找的学习算法不需要用户和艺术家的属性信息。这类算法通常称为协同过滤算法（http://en.wikipedia.org/wiki/Collaborative_filtering）。举个例子，根据两个用户的年龄相同来判断他们可能有相似的偏好，这不叫协同过滤。相反，根据两个用户播放过许多相同歌曲来判断他们可能都喜欢某首歌，这才叫协同过滤。

Audioscrobbler 数据集包含了数千万条某个用户播放了某个艺术家歌曲次数的信息，看起来是很大。但从另一方面来看数据集又很小而且不充足，因为数据集是稀疏的。虽然数据集覆盖 160 万个艺术家，但平均来算，每个用户只播放了大约 171 个艺术家的歌曲。有的用户只播放过一个艺术家的歌曲。对这类用户，我们也希望算法能给出像样的推荐。毕竟每个用户在某个时刻只能播放一首歌曲。

最后，我们希望算法的扩展性好，不但能用于构建大型模型，而且推荐速度快。我们通常都要求推荐是接近实时的，也就是在一秒内给出推荐，而不是要等一天。

本实例将用到潜在因素（http://en.wikipedia.org/wiki/Factor_analysis）模型中的一种模型，这类模型涉及的范围很广泛。潜在因素模型试图通过数量相对少的*未被观察到的底层原因*，来解释大量用户和产品之间*可观察到的交互*。打个比方：有几千个专辑可选，为什么数百万人偏偏只买其中某些专辑？可以用对类别（可能只有数十种）的偏好来解释用户和专辑的关系，其中偏好信息并不能直接观察到，而数据也没有给出这些信息。

说得更明确一些，本实例用的是一种矩阵分解模型（http://en.wikipedia.org/wiki/Non-negative_matrix_factorization）。数学上，这些算法把用户和产品数据当成一个大矩阵 A，矩阵第 i 行和第 j 列上的元素有值，代表用户 i 播放过艺术家 j 的音乐。矩阵 A 是稀疏的：A 中大多数元素都是 0，因为相对于所有可能的用户 – 艺术家组合，只有很少一部分组合会出现在数据中。算法将 A 分解为两个小矩阵 X 和 Y 的乘积。矩阵 X 和矩阵 Y 非常“瘦”，因为 A 有很多行和列，但 X 和 Y 的行很多而列很少（列数用 k 表示）。这 k 个列就是潜在因素，用于解释数据中的交互关系。

由于 k 的值小，矩阵分解算法只能是某种近似，如图 3-1 所示：

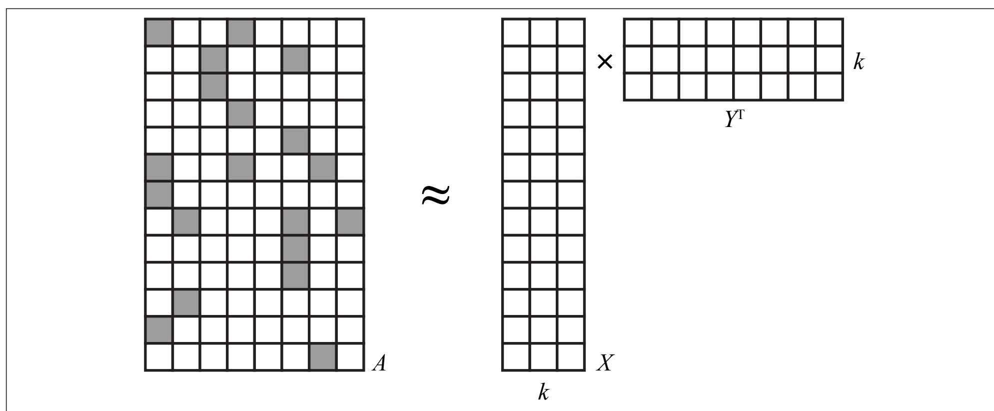


图 3-1：矩阵分解

矩阵分解算法有时称为矩阵补全（matrix completion）算法，因为原始矩阵 A 可能非常稀疏，但乘积 XY^T 是稠密的，即使该矩阵存在非零元素，非零元素的数量也非常少。因此模型只是对 A 的一种近似。原始 A 中大量元素是缺失的（元素值为 0），算法为这些缺失元素生成（补全）了一个值，从这个角度讲，我们可以把算法称为模型。

幸运的是，本例中的线性代数和我们的直觉很好地对应起来了。这种对应关系在这里是直接的，也是优雅的。两个矩阵分别有一行对应每个用户和每个艺术家。每行的值很少，只有 k 个。每个值代表了对应模型的一个隐含特征。因此行表示了用户和艺术家怎样关联到这些隐含特征，而隐含特征可能就对应偏好或类别。于是问题就简化为用户 – 特征矩阵和特征 – 艺术家矩阵的乘积，该乘积的结果是对整个稠密的用户 – 艺术家相互关系矩阵的完整估计。

不幸的是，$A = XY^T$ 通常根本没有解，原因就是 X 和 Y 通常不够大（严格来讲就是矩阵的阶太小），无法完美表示 A。这其实也是件好事。A 只是所有可能出现的交互关系的一个微小样本。在某种程度上我们认为 A 是对基本事实的一次观察，它太稀疏，因此很难解释这个基本事实。但用少数几个因素（k 个）就能很好地解释这个基本事实。想象一下你正在玩拼图游戏，图案是一只猫。游戏最终答案很简单，就是一只猫。但当你手头上只有几块拼板时，就会很难描述眼前看到的图案。

XY^T 应该尽可能逼近 A，毕竟这是所有后续工作的基础，但它不能也不应该完全复制 A。然而同样不幸的是，想直接同时得到 X 和 Y 的最优解是不可能的。好消息是，如果 Y 已知，求 X 的最优解是非常容易的，反之亦然。但 X 和 Y 事先都是未知的。

幸好有算法可以帮助我们摆脱这种两难的境地，并且能找到一个还不错的解决方案。具体来说，求解 X 和 Y 时，本章使用交替最小二乘（Alternating Least Squares，ALS）算法。这类方法在 Netflix 竞赛期间流行起来，对此一些论文功不可没，比如“Collaborative Filtering for Implicit Feedback Datasets”和“Large-scale Parallel Collaborative Filtering for the

Netflix Prize”。实际上 Spark MLlib 的 ALS 算法实现思想就来源于这两篇论文。

虽然 Y 是未知的，但我们可以把它初始化为随机行向量矩阵。接着运用简单的线性代数，就能在给定 A 和 Y 的条件下求出 X 的最优解。实际上，X 的第 i 行是 A 的第 i 行和 Y 的函数，因此可以很容易分开计算 X 的每一行。因为 X 的每一行可以分开计算，所以我们可以将其并行化，而并行化是大规模计算的一大优点。

$$A_i Y(Y^{\mathrm{T}} Y)^{-1} = X_i$$

要想两边精确相等是不可能的，因此实际的目标是最小化 $|A_i Y(Y^{\mathrm{T}} Y)^{-1} - X_i|$，或者最小化两个矩阵的平方误差。这就是算法名称中“最小二乘”的来由。这里给出方程式只是为了说明行向量计算方法，但实践中从来不会对矩阵求逆，我们会借助于 QR 分解（http://en.wikipedia.org/wiki/QR_decomposition）之类的方法，这种方法速度更快而且更直接。

同理，我们可以由 X 计算每个 Y_j。然后又可以由 Y 计算 X，这样反复下去。这就是算法名称中“交替”的来由。这里有一个小问题：Y 是“瞎编”的，并且是随机的。X 是最优化计算出来的，这没错，但给定的 Y 却是“假”的。好在，只要这个过程一直继续，X 和 Y 最终会收敛得到一个合适的结果。

将 ALS 算法用于隐性数据矩阵分解时，ALS 矩阵分解要稍微复杂一点儿。它不是直接分解输入矩阵 A，而是分解由 0 和 1 组成的矩阵 P，当 A 中元素为正时，P 中对应元素为 1，否则为 0。A 中的具体值后面会以权重的形式反映出来。本书不对其中细节做过多讨论，但我们有必要知道如何使用该算法。

最后，ALS 算法也可以利用输入数据是稀疏的这一特点。稀疏的输入数据、可以用简单的线性代数运算求最优解，以及数据本身可并行化，这三点使得算法在大规模数据上速度非常快。这也就是我们要把 ALS 算法作为本章主题的主要原因，同时也解释了为什么到目前为止 Spark MLlib 只有 ALS 一种推荐算法。

3.3　准备数据

将三个数据文件全部复制到 HDFS。本章假定文件放在 /user/ds/ 目录下，启动 `spark-shell`。注意本章的运算需要占用非常多的内存。如果运行在本地而不是在集群上，为了保证内存充足，在启动 `spark-shell` 时需求指定参数 `--driver-memory 6g`。

构建模型的第一步是了解数据，对数据进行解析或转换，以便在 Spark 中做分析。

Spark MLlib 的 ALS 算法实现有一个小缺点：它要求用户和产品的 ID 必须是数值型，并且是 32 位非负整数。这意味着大于 `Integer.MAX_VALUE`（即 2147483647）的 ID 都是非法的。我们的数据集是否已经满足了这个要求？利用 `SparkContext` 的 `textFile` 方法，将数据文件转换成 `String` 类型的 RDD：

```
val rawUserArtistData = sc.textFile("hdfs:///user/ds/user_artist_data.txt")
```

默认情况下，RDD 为每个 HDFS 块生成一个分区，将 HDFS 块大小设为典型的 128 MB 或 64 MB。由于 HDFS 文件大小为 400 MB，所以文件被拆为 3 个或 6 个分区。这通常没什么问题，但由于相比简单文本处理，ALS 这类机器学习算法要消耗更多的计算资源，因此减小数据块大小以增加分区个数会更好。减小数据块大小能使 Spark 处理任务时同时使用的处理器核数更多。可以为 `textFile` 方法设置第二个参数，用这个参数指定一个不同于默认值的分区数，这样就可以将分区数设得大一些。比如，可以考虑将这个参数设为集群处理器总核数。

文件的每行包含一个用户 ID、一个艺术家 ID 和播放次数，用空格分隔。要计算用户 ID 的统计信息，可以用空格拆分每行，并将第一个值（下标为 0）解析为一个数。方法 `stats()` 返回统计信息对象，包括最大值和最小值。同样我们可以处理艺术家 ID：

```
rawUserArtistData.map(_.split(' ')(0).toDouble).stats()
rawUserArtistData.map(_.split(' ')(1).toDouble).stats()
```

打印出的结果统计信息显示，最大的用户 ID 和艺术家 ID 分别为 2443548 和 10794401，都远小于 2147483647，因此没必要对这些 ID 做进一步处理。

我们知道，在本章示例中的艺术家名字对应模糊的数值 ID。这些信息包含在 artist_data.txt 中。现在 artist_data.txt 包含艺术家 ID 和名字，它们用制表符分隔。但是简单地把文件解析成二元组 `(Int,String)` 会出错：

```
val rawArtistData = sc.textFile("hdfs:///user/ds/artist_data.txt")
val artistByID = rawArtistData.map { line =>
  val (id, name) = line.span(_ != '\t')
  (id.toInt, name.trim)
}
```

这里 `span()` 用第一个制表符将一行拆分成两部分，接着将第一部分解析为艺术家 ID，剩余部分作为艺术家的名字（去掉了空白的制表符）。文件里有少量行看起来是非法的：有些行没有制表符，有些行不小心加入了换行符。这些行会导致 `NumberFormatException`，它们不应该有输出结果。

然而，`map()` 函数要求对每个输入必须严格返回一个值，因此这里不能用这个函数。另一种可行的方法是用 `filter()` 方法删除那些无法解析的行，但这会重复解析逻辑。当需要将每个元素映射为零个、一个或更多结果时，我们应该使用 `flatMap()` 函数，因为它将每个输入对应的零个或多个结果组成的集合简单展开，然后放入到一个更大的 RDD 中。它可以和 Scala 集合一起使用，也可以和 Scala 的 `Option` 类一起使用。`Option` 代表一个值可以不存在，有点儿像只有 1 或 0 的一个简单集合，1 对应子类 `Some`，0 对应子类 `None`。因此在以下代码中，虽然 `flatMap` 中的函数本可以简单返回一个空 `List`，或一个只有一个元素

的 List，但使用 Some 和 None 更合理，这种方法简单明了。

```
val artistByID = rawArtistData.flatMap { line =>
  val (id, name) = line.span(_ != '\t')
  if (name.isEmpty) {
    None
  } else {
    try {
      Some((id.toInt, name.trim))
    } catch {
      case e: NumberFormatException => None
    }
  }
}
```

artist_alias.txt 将拼写错误的艺术家 ID 或非标准的艺术家 ID 映射为艺术家的正规名字。其中每行有两个 ID，用制表符分隔。这个文件相对较小，有 200 000 个记录。有必要把它转成 Map 集合的形式，将“不良的”艺术家 ID 映射到“良好的”ID，而不是简单地把它作为包含艺术家 ID 二元组的 RDD。这里又有一点小问题：由于某种原因有些行没有艺术家的第一个 ID。这些行将被过滤掉：

```
val rawArtistAlias = sc.textFile("hdfs:///user/ds/artist_alias.txt")
val artistAlias = rawArtistAlias.flatMap { line =>
  val tokens = line.split('\t')
  if (tokens(0).isEmpty) {
    None
  } else {
    Some((tokens(0).toInt, tokens(1).toInt))
  }
}.collectAsMap()
```

比如，第一条将 ID 6803336 映射为 1000010。接下来我们可以从包含艺术家名字的 RDD 中进行查找：

```
artistByID.lookup(6803336).head
artistByID.lookup(1000010).head
```

显然，这条记录将“Aerosmith (unplugged)”映射为“Aerosmith”。

3.4 构建第一个模型

虽然现在数据集的形式完全符合 Spark MLlib 的 ALS 算法实现的要求，但我们还需要额外做两个转换。第一，如果艺术家 ID 存在一个不同的正规 ID，我们要用别名数据集将所有的艺术家 ID 转换成正规 ID。第二，需要把数据转成 Rating 对象，Rating 对象是 ALS 算法实现对“用户 – 产品 – 值”的抽象。除了名字有点儿不太合适之外，Rating 合适用于隐含数据。这里还要注意，MLlib 在其 API 中使用“产品”（product）这个术语，本章沿用这个术语。但读者应该明白，这里的“产品”是指艺术家。底层的模型不仅仅局限于产品

推荐（即向人们推荐物品）：

```
import org.apache.spark.mllib.recommendation._

val bArtistAlias = sc.broadcast(artistAlias)

val trainData = rawUserArtistData.map { line =>
  val Array(userID, artistID, count) = line.split(' ').map(_.toInt)
  val finalArtistID =
    bArtistAlias.value.getOrElse(artistID, artistID) ❶
  Rating(userID, finalArtistID, count)
}.cache()
```

❶ 如果艺术家存在别名，取得艺术家别名，否则取得原始名字。

虽然刚创建的 `artistAlias` 是驱动程序本地的一个 `Map`，我们仍然可以在 RDD 的 `map()` 函数中直接引用它。这是没问题的，因为 `artistAlias` 会随任务一起被自动复制。但是，它的体量可不小，要消耗大约 15 MB 内存，哪怕是序列化形式最少也得占用几兆字节。因为一个 JVM 中有许多任务，所以发送和存储如此多的副本太浪费了。

这时，我们可以为 `artistAlias` 创建一个广播变量，取名为 `bArtistAlias`。使用广播变量时，Spark 对集群中每个 executor 只发送一个副本，并且在内存里也只保存一个副本。如果有几千个任务在 executor 上并行执行，使用广播变量能节省巨大的网络流量和内存。

广播变量

Spark 执行一个阶段（stage）时，会为待执行函数建立闭包，也就是该阶段所有任务所需信息的二进制形式。这个闭包包括驱动程序里函数引用的所有数据结构。Spark 把这个闭包发送到集群的每个 executor 上。

当许多任务需要访问同一个（不可变的）数据结构时，我们应该使用广播变量。它对任务闭包的常规处理进行扩展，使我们能够：

- 在每个 executor 上将数据缓存为原始的 Java 对象，这样就不用为每个任务执行反序列化；
- 在多个作业和阶段之间缓存数据。

举个例子，考虑自然语言处理应用的场景，这里需要用到一本大型英语单词词典。广播词典使得对每个 executor 只要执行一次传输数据：

```
val dict = ...
val bDict = sc.broadcast(dict)
...
def query(path: String) = {
  sc.textFile(path).map(l => score(l, bDict.value))
  ...
}
```

调用 cache() 以指示 Spark 在 RDD 计算好之后将其暂时存储在集群的内存里。这样是有益的，因为 ALS 算法是迭代的，通常情况下至少要访问该数据 10 次以上。如果不调用 cache()，那么每次要用到 RDD 时都需要从原始数据中重新计算。如图 3-2 所示，Spark UI 界面的 Storage 标签页显示了有多少 RDD 被缓存起来了，占用了多少内存。图中 RDD 占用了集群将近 900 MB 的内存。

Storage Level	Cached Partitions	Fraction Cached	Size in Memory
Memory Deserialized 1x Replicated	120	100%	886.8 MB

图 3-2：Spark UI 的 Storage 标签页，显示缓存 RDD 内存使用情况

最后，我们构建模型：

```
val model = ALS.trainImplicit(trainData, 10, 5, 0.01, 1.0)
```

这样我们就构建了一个 MatrixFactorizationModel 模型。这个操作可能要花费几分钟或者更长时间，具体时间取决于所用的集群。有些机器学习模型最终可能只有几个参数或系数，相比之下，我们这里使用的模型是巨大的。对于每个用户和产品，模型都包含一个有 10 个值的特征向量。在本章的示例中，总共有超过 170 万个特征向量。模型用两个不同的 RDD，它们分别表示“用户 – 特征”和“产品 – 特征”这两个大型矩阵。

想看看某些特征向量，试试以下代码。注意，特征向量是一个包含 10 个数值的数组，数组的打印形式原本是不可读的。代码用 mkString() 把向量翻译成可读的形式，在 Scala 中，mkString() 方法常用于把集合元素表示成以某种形式分隔的字符串。

```
model.userFeatures.mapValues(_.mkString(", ")).first()

...
(4293,-0.3233030601963864, 0.31964527593541325,
   0.49025505511361034, 0.09000932568001832, 0.4429537767744912,
   0.4186675713407441, 0.8026858843673894, -0.4841300444834003,
  -0.12485901532338621, 0.19795451025931002)
```



你看到的结果会有些不同，原因是最终的模型取决于初始特征向量，而这些初始特征向量是随机选择的。

trainImplicit() 中的其他参数都是超参数，它们的值将影响模型的推荐质量，我们稍后再详细解释。更重要的是，首先要问：模型质量怎样？模型能给出好的推荐吗？

3.5 逐个检查推荐结果

应该看看模型给出的艺术家推荐直观上是否合理，我们检查一下用户播放过的艺术家，然后看看模型向用户推荐的艺术家。具体来看看用户 2093760 的例子。现在我们要提取该用户收听过的艺术家 ID 并打印他们的名字，这意味着先在输入数据中搜索该用户收听过的艺术家的 ID，然后用这些 ID 对艺术家集合进行过滤，这样我们就可以获取并按序打印这些艺术家的名字：

```
val rawArtistsForUser = rawUserArtistData.map(_.split(' ')).
  filter { case Array(user,_,_) => user.toInt == 2093760 } ❶

val existingProducts =
  rawArtistsForUser.map { case Array(_,artist,_) => artist.toInt }.
  collect().toSet ❷

artistByID.filter { case (id, name) =>
  existingProducts.contains(id)
}.values.collect().foreach(println) ❸

...
David Gray
Blackalicious
Jurassic 5
The Saw Doctors
Xzibit
```

❶ 找到用户 2093760 对应的行。

❷ 收集不同的艺术家。

❸ 过滤艺术家，取出艺术家并打印。

用户播放过的艺术家既有大众流行音乐风格的也有嘻哈风格的。难道用户是 Jurassic 5 乐队的粉丝？记住这是 2005 年。提醒一下：Saw Doctors 是一支典型爱尔兰风格的摇滚乐队，在爱尔兰非常受欢迎。

类似地，我们可以对该用户作出 5 个推荐：

```
val recommendations = model.recommendProducts(2093760, 5)
recommendations.foreach(println)

...
Rating(2093760,1300642,0.02833118412903932)
Rating(2093760,2814,0.027832682960168387)
Rating(2093760,1037970,0.02726611004625264)
Rating(2093760,1001819,0.02716011293509426)
Rating(2093760,4605,0.027118271894797333)
```

结果由 `Rating` 对象组成，包括用户 ID（重复的）、艺术家 ID 和一个数值。虽然字段名称

叫 `rating`，但其实不是估计的得分。对这类 ALS 算法，它是一个在 0 到 1 之间的模糊值，值越大，推荐质量越好。它不是概率，但可以把它理解成对 0/1 值的一个估计，0 表示用户不喜欢播放艺术家的歌曲，1 表示喜欢播放艺术家的歌曲。

得到所推荐艺术家的 ID 之后，就可以用类似的方法查到艺术家的名字：

```
val recommendedProductIDs = recommendations.map(_.product).toSet

artistByID.filter { case (id, name) =>
  recommendedProductIDs.contains(id)
}.values.collect().foreach(println)

...
Green Day
Linkin Park
Metallica
My Chemical Romance
System of a Down
```

结果包含流行朋克风格和金属乐风格。我们一眼就能看出，这些推荐都不怎么样。虽然推荐的艺术家都受人欢迎，但好像并没有针对用户的收听习惯进行个性化。

3.6 评价推荐质量

当然，刚才只是对一个用户的推荐结果的一次主观评价。除了用户本人，其他任何人都很难对推荐的好坏给出定量描述。而且，想对推荐结果做人工评分，哪怕只评价一小部分结果，也是不切实际的。

我们假定用户会倾向于播放受人欢迎的艺术家的歌曲，而不会播放不受欢迎的艺术家的歌曲，这个假设是合理的。因此，用户的播放数据在一定程度上表示了“优秀的”和“糟糕的”艺术家推荐。这个假设虽然还有点儿问题，但是在没有其他数据的情况下，也只能这么做了。比如，170 万个艺术家，除了之前推荐的 5 个艺术家之外没有播放过的艺术家中，用户 2093760 很可能对其中某些感兴趣，所以不能说没有听过的艺术家都是“糟糕的”，都不能推荐。

如果根据好艺术家在推荐列表中排名应该靠前这个标准来评价推荐引擎，情况会怎样？推荐引擎这类的评分系统有几个指标，这个指标是其中之一。问题是如果将“好”的标准定义为“用户收听过艺术家”，那么推荐系统在输入中已经利用了这些信息。它可以简单把用户以前听过的艺术家作为最靠前的推荐结果返回，而这样就能得到最高的评价。然而这是无益的，因为推荐引擎的作用在于向用户推荐他从来没听过的艺术家。

为了使推荐变得有用，可以从数据集中拿出一些艺术家的播放数据放在一边，在整个 ALS 模型构建过程中并不使用这些数据。这些放在一边的数据中的艺术家可以作为每个用户的

优秀推荐，但这些数据并没有喂给推荐引擎。让推荐引擎对模型中所有的产品进行评分，然后对比检查放在一边的艺术家的推荐排名情况。理想情况下，推荐引擎对这些艺术家的推荐排名应该最靠前或接近最靠前。

接着我们就可以计算推荐引擎的得分，方法是比较放在一边的艺术家推荐排名和整个数据集中的艺术家的推荐排名（在实践中，我们通常只比较一小部分，因为需要比较的艺术家组合可能非常多）。对比组合中放在一边的艺术家排名高的组合所占比例就是模型的得分。1.0 代表最好，0.0 代表最差，0.5 是随机给艺术家排名的模型的期望得分。

这个指标和一个信息检索概念直接相关，这个概念就是观测者操作特性（Receiver Operating Characteristic，ROC，http://en.wikipedia.org/wiki/Receiver_operating_characteristic）曲线。上一段中的指标等于 ROC 曲线下区域的面积，称为 AUC（Area Under the Curve）。可以把 AUC 看成是随机选择的好推荐比随机选择的差推荐的排名高的概率。

AUC 指标也用于评价分类器。MLlib 的 `BinaryClassificationMetrics` 类实现了这个指标及相关方法。对于推荐引擎，为*每个用户*计算 AUC 并取其平均值，最后的结果指标稍有不同，可称为“平均 AUC”。

其他和评分系统相关的评价指标在 `RankingMetrics` 类中实现。这些指标包括准确率、召回率和平均准确度（Mean Average Precision，MAP，https://en.wikipedia.org/wiki/Information_retrieval）。MAP 也常用，它更强调排在最前面的推荐的质量。但是，AUC 作为一种普遍和综合的测量整体模型输出质量的手段，是我们采用的。

事实上，取出一部分数据来选择模型并评估模型准确度是所有机器学习的通用做法。通常数据被分成三个子集：训练集、检验（Cross-Validation，CV）集和测试集。在本章的初步示例中，我们只用了两个数据集：训练集和检验集。这对于模型选择来说已经足够了。第 4 章会进一步讨论这个概念并介绍测试集。

3.7 计算AUC

AUC 的具体实现请参考本书附带的源代码。代码实现比较复杂，请参考源代码的注释，这里我们就不重复说明了。该实现接受一个检验集 CV 和一个预测函数，CV 集代表每个用户对应的“正面的”或“好的”艺术家。预测函数把每个“用户 – 艺术家”对转换为一个预测 `Rating`。`Rating` 包含了用户、艺术家和一个数值，这个值越高，代表推荐的排名越高。

为了利用输入数据，我们需要把它分成训练集和检验集。训练集只用于训练 ALS 模型，检验集用于评估模型。这里我们将 90% 的数据用于训练，剩余的 10% 用于交叉检验：

```
import org.apache.spark.rdd._

def areaUnderCurve(
```

```
    positiveData: RDD[Rating],
    bAllItemIDs: Broadcast[Array[Int]],
    predictFunction: (RDD[(Int,Int)] => RDD[Rating])) = {
  ...
}

val allData = buildRatings(rawUserArtistData, bArtistAlias) ❶
val Array(trainData, cvData) = allData.randomSplit(Array(0.9, 0.1))
trainData.cache()
cvData.cache()

val allItemIDs = allData.map(_.product).distinct().collect() ❷
val bAllItemIDs = sc.broadcast(allItemIDs)

val model = ALS.trainImplicit(trainData, 10, 5, 0.01, 1.0)
val auc = areaUnderCurve(cvData, bAllItemIDs, model.predict)
```

❶ 这个函数在附带的源代码中定义。

❷ 去重并收集给驱动程序。

注意：`areaUnderCurve()` 把一个函数作为它的第三个参数。这里传入的是 `MatrixFactorizationModel` 的 `predict()`，很快我们会把它替换成其他方法。

结果是大约 0.96。这个结果好吗？它肯定比随机推荐的 0.5 要好。模型得分 0.96 接近最高分 1.0。一般 AUC 超过 0.9 是高分。

可以从数据集中选择另外的 90% 作为训练集，这样就可以多次进行模型评估。得到的 AUC 值的平均可能会更好地估计算法在数据集上的表现。实际中一个常用的做法是把数据集分成 *k* 个大小差不多的子集，用 *k*–1 个子集做训练，在剩下的一个子集上做评估。我们把这个过程重复 *k* 次，每次用一个不同的子集做评估。这种做法称为 *k* 折交叉验证（k-fold cross-validation，https://en.wikipedia.org/wiki/Cross-validation_(statistics)）算法。为了简便，我们在示例中并没有实现 *k* 折交叉验证技术。但 MLlib 的辅助方法 `MLUtils.kFold()` 在一定程度上提供了对这项技术的支持。

有必要把上述方法和一个更简单方法做一个基准比对。举个例子，考虑下面的推荐方法：向每个用户推荐播放最多的艺术家。这个策略一点儿都不个性化，但它很简单，也可能有效。定义这个简单预测函数并评估它的 AUC 得分：

```
def predictMostListened(
    sc: SparkContext,
    train: RDD[Rating])(allData: RDD[(Int,Int)]) = {

  val bListenCount = sc.broadcast(
    train.map(r => (r.product, r.rating)).
      reduceByKey(_ + _).collectAsMap()
    )
    allData.map { case (user, product) =>
```

```
        Rating(
        user,
        product,
        bListenCount.value.getOrElse(product, 0.0)
      )
    }
  }

  val auc = areaUnderCurve(
    cvData, bAllItemIDs, predictMostListened(sc, trainData))
```

这里再次显示了 Scala 语法的特别之处。这里函数定义看似有两个参数列表。调用函数并应用前两个参数得到了一个*偏应用函数*（partially applied function），这个函数本身又带一个参数（`allData`）并返回预测结果。`predictMostListened(sc, trainData)` 的返回结果是一个*函数*。

结果得分大约是 0.93。这意味对 AUC 这个指标，非个性化的推荐表现已经不错了。看到我们目前构建的模型打败了简单推荐方法，感觉还是不错的。但模型还有没有可能做得更好呢？

3.8　选择超参数

到目前为止，我们并没有对给出的超参数值做任何说明。这些值不是由算法学习得到的，而是由调用者指定的。`ALS.trainImplicit()` 的参数包括以下几个。

- `rank` = 10
  模型的潜在因素的个数，即“用户 – 特征”和“产品 – 特征”矩阵的列数；一般来说，它也是矩阵的阶。
- `iterations` = 5
  矩阵分解迭代的次数；迭代的次数越多，花费的时间越长，但分解的结果可能会更好。
- `lambda` = 0.01
  标准的过拟合参数；值越大越不容易产生过拟合，但值太大会降低分解的准确度。
- `alpha` = 1.0
  控制矩阵分解时，被观察到的“用户 – 产品”交互相对没被观察到的交互的权重。

可以把 `rank`、`lambda` 和 `alpha` 看作为模型的*超参数*。（`iterations` 更像是对分解过程使用的资源的一种约束。）这些值不会体现在 `MatrixFactorizationModel` 的内部矩阵中，这些矩阵只是参数，其值由算法选定。而 `rank`、`lambda` 和 `alpha` 这几个超参数是构建过程本身的参数。

刚才列表中给出的超参数值不一定是最优的。如何选择好的超参数值在机器学习中是个普遍性问题。最基本的方法是尝试不同值的组合并对每个组合评估某个指标，然后挑选指标值最好的组合。

在下面的示例中，我们尝试了 8 中可能的组合：`rank = 10` 或 50、`lambda = 1.0` 或 0.0001，以及 `alpha = 1.0` 或 40.0。这些值当然也是猜的，但它们能够覆盖很大范围的参数值。各种组合的结果按 AUC 得分从高到底排序：

```
val evaluations =
  for (rank   <- Array(10,  50);
       lambda <- Array(1.0, 0.0001);
       alpha  <- Array(1.0, 40.0))  ❶
    yield {
      val model = ALS.trainImplicit(trainData, rank, 10, lambda, alpha)
      val auc = areaUnderCurve(cvData, bAllItemIDs, model.predict)
      ((rank, lambda, alpha), auc)
    }

evaluations.sortBy(_._2).reverse.foreach(println) ❷

...
((50,1.0,40.0),0.9776687571356233)
((50,1.0E-4,40.0),0.9767551668703566)
((10,1.0E-4,40.0),0.9761931539712336)
((10,1.0,40.0),0.976154587705189)
((10,1.0,1.0),0.9683921981896727)
((50,1.0,1.0),0.9670901331816745)
((10,1.0E-4,1.0),0.9637196892517722)
((50,1.0E-4,1.0),0.9543377999707536)
```

❶ 可以理解为三层嵌套 `for` 循环。

❷ 根据第二个值（AUC）降序排序并打印。



这里的 `for` 语法是 Scala 中写嵌套循环的一种方式，相当于一个 `alpha` 循环外面嵌套一个 `lambda` 循环外面再嵌套一个 `rank` 循环。

有意思的是，参数 `alpha` 取 40 的时候看起来总是比取 1 表现好（为了满足读者的好奇，顺便提一下，40 是前面提到的最初 ALS 论文的默认值之一）。这说明了模型在强调用户听过什么时的表现要比强调用户没听过什么时要好。

`lambda` 取较大的值看起来结果要稍微好一些。这表明模型有些受过拟合的影响，因此需要一个较大的 `lambda` 值以防止过度精确拟合每个用户的稀疏输入数据。第 4 章将进一步讨论过拟合。

特征值的个数影响不是很明显；在分数最高的组合和分数最低的组合中均出现特征值个数取 50 的情况，虽然分数绝对值变化也不大。这可能表示正确的特征值个数实际上比 50 大，而特征值个数太小时无论特征值个数是多少区别都不大。

当然我们可以重复上述过程，试试不同的取值范围或试试更多值。这是超参数选择的一种暴力方式。但是在当今这个世界，这种简单粗暴的方式变得相对可行：集群常常有几 TB 内存，成百上千个核，Spark 之类的框架可以利用并行计算和内存来提高速度。

严格来说，理解超参数的含义其实不是必需的，但知道这些值的典型范围有助于找到一个合适的参数空间开始搜索，这个空间不宜太大，也不能太小。

3.9　产生推荐

现在用上一节中得到用最优超参数继续下面的工作，看看新模型对 ID 为 2093760 的用户给出什么样推荐：

```
50 Cent
Eminem
Green Day
U2
[unknown]
```

令人欣慰的是，现在给出的推荐要更合理一些，其中包含了两位嘻哈风格的艺术家。推荐列表中 `[unknown]` 明显不是一个艺术家。查看原始数据集会发现 `[unknown]` 出现了 429 447 次，几乎可以排到前 100 了。`[unknown]` 是没有艺术家信息的播放记录的一个默认值，可能是某个客户端提供的。这个信息是没有用的，下次我们应该在开始的时候把它扔掉。这又再次说明，数据科学实践往往是迭代式的，每个阶段我们对数据都有新发现。

这个模型可以对所有用户产生推荐。它可以用于批处理，批处理每隔一个小时或更短的时间为所有用户重算模型和推荐结果，具体时间间隔取决于数据规模和集群速度。

但是目前 Spark MLlib 的 ALS 实现并不支持向所有用户给出推荐。该实现可以每次对一个用户进行推荐，这样每一次都会启动一个短的几秒钟的分布式作业。这适合对小用户群体快速重算推荐。下面对数据中的 100 个用户进行推荐并打印结果：

```
val someUsers = allData.map(_.user).distinct().take(100) ❶
val someRecommendations =
  someUsers.map(userID => model.recommendProducts(userID, 5)) ❷
someRecommendations.map(
  recs => recs.head.user + " -> " + recs.map(_.product).mkString(", ") ❸
).foreach(println)
```

❶ 把 100 个（不同的）用户复制到驱动程序端。

❷ `map()` 在这里是一个本地 Scala 运算。

❸ `mkString` 用分隔符把集合中的元素连接成一个字符串。

现在只是把推荐结果打印出来。结果也可以写到外部存储上，比如写到 HBase 上，这样可以利用 HBase（http://hbase.apache.org/）在运行时提供快速查询。

有意思的是，整个流程也可能用于向艺术家推荐用户。这可用于回答类似如下问题："艺术家 *X* 的新专辑哪 100 个用户可能最感兴趣？"在向艺术家推荐用户时，只需要在解析输入的时候对换用户和艺术家字段就可以了。

```
rawUserArtistData.map { line =>
  ...
  val userID = tokens(1).toInt ❶
  val artistID = tokens(0).toInt ❷
  ...
}
```

❶ 把艺术家当成"用户"。

❷ 把用户当成"艺术家"。

3.10 小结

显然我们可以花多点儿时间来对模型参数进行调优，找出输入数据中的异常情况，比如说有的艺术家的名字为 `[unknown]`，并修复这些问题。

举个例子来说，对播放次数进行快速分析就会发现，ID 为 2064012 的用户播放 ID 为 4468 的艺术家高达 439 771 次，这太让人吃惊了。假定每首歌曲长度为 4 分钟，如果播放"Chop Suey!"和"B.Y.O.B."这样的热门歌曲，33 年也完成不了。因为乐队在 1998 年才开始录制唱片，所以如果同时播放 4 到 5 首单曲，也要 7 年。所以这肯定是垃圾数据、数据错误或者某类的实际数据问题，这些问题生产系统必须要解决。

ALS 不是唯一的推荐引擎算法。目前它是 Spark MLlib 唯一支持的算法。但是，对于非隐含数据，MLlib 也支持一种 ALS 的变体，它的用法和 ALS 是一样的，不同之处在于模型用方法 `ALS.train()` 构建。它适用于给出评分数据而不是次数数据。比如，如果数据集是用户对艺术家的打分，值从 1 到 5，那么用这种变体就很合适。不同推荐方法返回的 `Rating` 对象结果，其中 `rating` 字段是估计的打分。

今后 Spark MLlib 或其他库可能支持其他推荐算法。

在生产环境下，推荐引擎需要实时给出推荐，因为它们常用于电商网站。在这类环境中，客户浏览商品页面时需要推荐引擎频繁给出推荐。像前面提到的那样，预先计算并把得到的推荐结果存到一个 NoSQL 存储中，在大规模情况下不失为一种合理的策略。这种做法

的一个缺点是需要对所有可能提供快速推荐的用户进行预计算，但这些用户可能是任何一个用户。举例来讲，即使 100 万个用户中每天只有 10 000 个访问网站，我们也要为 100 万个用户做预计算，其中 99% 的工作是浪费的。

如果能随时按需计算出推荐结果就更好了。虽然我们可以用 `MatrixFactorizationModel` 为单个用户计算推荐结果，它却还是一个分布式运算，需要花费几秒钟。因为 `MatrixFactorizationModel` 非常大，所以实际上是个分布式数据集。其他模型情况有些不同，它们可以更快地给出评分。Oryx 2（https://github.com/OryxProject/oryx）之类的项目试图实现实时按需推荐，其底层用 MLlib 之类的库，但用高效的方式访问内存中的模型数据。

第4章

用决策树算法预测森林植被

作者：Sean Owen

预测是非常困难的，更别提预测未来。

——Niels Bohr

19 世纪末，英国科学家弗兰西斯 · 高尔顿（Francis Galton，达尔文的表兄）爵士忙于测量豌豆和人类的大小来寻找规律。他发现大豌豆的子代一般会大于子代豌豆的平均大小（人类也如此）。这没有什么好奇怪的。但是，大豌豆的子代通常比它们的父代要小。对人类而言，身高 7 英尺的篮球运动员的孩子很可能比一般人要高，但是身高达到 7 英尺的可能性却较小。

高尔顿这个研究的另一个成果是，他通过绘制子代大小与父代大小的关系图，发现二者之间存在近似的线性关系。父代豌豆大，子代豌豆也大，但要略小于父代豌豆；父代豌豆小，子代豌豆也小，但要略大于父代豌豆。因此曲线斜率为正但小于 1，高尔顿把这种现象称为*趋均数回归*（regression to the mean），此名称被沿用至今。

依我看，这条线就是早期的预测模型，尽管当时还没有人这么提出。这条线把两个值关联在一起，意味着知道了一个值就大体知道了另一个值。如果知道一颗新豌豆的大小，根据这种关联关系，我们就能更准确估计其后代的大小，这样做出的估计要比简单假设“子代”的大小接近于“父代或同类”更准确。

4.1 回归简介

经过随后一百多年统计学的发展，随着现代机器学习和数据科学的出现，我们依旧把从“某些值”预测“另外某个值”的思想称为回归（http://en.wikipedia.org/wiki/Regression_analysis），即使它已经和“趋均数回归”没有任何关系，也跟“向后移动”不沾边。回归技术和分类（http://en.wikipedia.org/wiki/Statistical_classification）技术关系紧密。通常来讲，*回归*是预测一个数值型数量（numeric quantity），比如大小、收入和温度，而*分类*则指预测标号（label）或类别（category），比如判断邮件是否为“垃圾邮件”，拼图游戏的图案是否是“猫”。

将回归和分类联系在一起是因为两者都可以通过一个（或更多）值预测另一个（或更多）值。为了能够作出预测，两者都需要从一组输入和输出中学习预测规则。在学习过程中，需要告诉它们问题以及问题的答案。因此，它们都属于所谓的*监督学习*（http://en.wikipedia.org/wiki/Supervised_learning）。

分类和回归是分析预测中最古老的话题，也是被研究得最多的一类问题。分析用的程序包（package）和程序库（library）中的多数算法，都属于分类和回归技术，比如支持向量机、逻辑回归、朴素贝叶斯算法、神经网络和深度学习。第 3 章介绍的推荐系统，相对容易解释，但那也是机器学习领域中一个相对比较新和比较独立的子课题。

本章将重点关注*决策树算法*（http://en.wikipedia.org/wiki/Decision_tree）和它的扩展*随机决策森林算法*（http://en.wikipedia.org/wiki/Random_forest），这两个算法灵活且应用广泛，既可用于分类问题，也可用于回归问题。更让人兴奋的是，它们可以帮助我们预测未来，至少是预测我们尚不肯定的事情。比如说，根据线上行为来预测购买汽车的概率，根据用词预测邮件是否是垃圾邮件，根据地理位置和土壤的化学成分预测哪块耕地的产量可能更高。

4.2 向量和特征

为了便于解释本章选择的数据集和要着重介绍的算法，以及为了便于下一步介绍回归和分类的原理，有必要先对描述输入和输出的术语做个简短定义。

我们想根据今天的天气预测明天的气温。这个没有问题，但“今天的天气”是个宽泛的概念，在用于机器学习算法之前我们需要对它进行结构化。

“今天的天气”中某些“特征”确实可能可以用来预测明天的气温，比如：

- 今天的最低气温
- 今天的最高气温
- 今天的平均湿度

- 今天是多云，有雨还是晴朗
- 今天有几家天气预报站预报明天有寒流

这些特征有时也被称为*维度*、*预测指标*或简单地称为*变量*。以上每个特征都可以被量化。比如气温高低可以用“摄氏度”度量，湿度可以用 0~1 范围内的小数来度量，天气类型可以用“多云”“有雨”和“晴朗”来标示。天气预报的个数则是个整数。因此今天的天气可以简化为一个值列表：`13.1，19.0，0.73，多云，1`。

这五个特征值按顺序排列，就是所谓的*特征向量*，它可用于描述每天的天气。这种用法与线性代数里的“向量”比较类似，但稍微不同的是，这里我们所说的向量值可以包含非数值，有些值甚至可以为空。

这些特征值的类型各有不同。前两个特征用“摄氏度”来计量，第三个特征则是个不带单位的小数。第四个根本就不是数值，第五个是一个非负整数。

为了便于讨论，本书将特征只分为两大类：*类别型特征*（categorical feature）和*数值型特征*（numeric feature）。

这里的数值型特征是指可以用数值进行量化的特征，并且对这些特征排序是有意义的。比如，今天最高气温为 23 摄氏度，它比昨天最高气温 22 摄氏度要高，这种说法是有意义的。除天气类型外，前面提到的所有特征都是数值型特征。“晴朗”这类词语不是数字，没有大小顺序可言。“多云比晴朗大”这种说法是没有意义的。天气类型就属于类别型特征，类别型特征只能在几个离散值中取一个。

4.3 样本训练

为了进行预测，学习算法需要在大量数据上进行训练。这需要从历史数据中获取大量的数据输入和相应的已知的正确的数据输出。比如，在示例中我们会向学习算法给出如下样本数据：某一天，气温 12~16 摄氏度，湿度 10%，晴朗，没有寒流预报，第二天最高气温为 17.2 摄氏度。如果这样的样本数量足够多，学习算法就可能学会以一定准确度来预测第二天最高气温。

特征向量为学习算法的输入提供了一种结构化的方式（如输入：`12.5,15.5,0.10,晴朗,0`）。预测的输出（即*目标*）也被称为一个特征，它是一个数值型特征：`17.2`。

通常我们把目标作为特征向量的一个附加特征。因此可以把整个训练样本列示为：`12.5,15.5,0.10,晴朗,0,17.2`。所有这些样本的集合称为*训练集*。

读者要注意，回归和分类的区别在于：回归问题的目标为数值型特征，而分类问题的目标为类别型特征。并不是所有的回归或分类算法都能够处理类别型特征或类别型目标，有些算法只能处理数值型特征。

4.4　决策树和决策森林

事实证明，*决策树*算法家族能自然地处理类别型和数值型特征。决策树算法容易并行化。它们对数据中的离群点（outlier）具有鲁棒性（robust），这意味着一些极端或可能错误的数据点根本不会对预测产生影响。算法可以接受不同类型和量纲的数据，对数据类型和尺度不相同的情况不需要做预处理或规范化。数据类型和尺度不相同的问题在第 5 章会再次涉及。

决策树可以推广为更强大的*决策森林*（random decision forest）算法。由于决策森林算法的灵活性，我们认为有必要在本章介绍它。本章将会把 Spark MLlib 的 `DecisionTree` 和 `RandomForest` 算法实现应用到一个数据集上。

基于决策树的算法还有一个优点，那就是理解和推理起来相对直观。实际上，我们在日常生活中大概都无意间用过决策树所体现的推理方法。举个例子，早上我正要坐下来喝杯加奶咖啡，在打定主意在咖啡中加牛奶之前，我会预测：牛奶有没有变质呢？我不确定牛奶是否变质。于是我会检查一下牛奶的建议食用期。如果建议食用期没过，我会预测牛奶没有坏。如果已经超过建议食用期三天，我会预测牛奶已经坏了。如果超过建议食用期 3 天之内，我会闻一下。如果牛奶的气味有点儿异常，我会预测牛奶已经坏了，否则就没坏。

这一系列的“是 / 否”判断就是决策树算法所体现的预测过程。每个判断会走到两个分支中的一个，非此即彼，如图 4-1 所示。

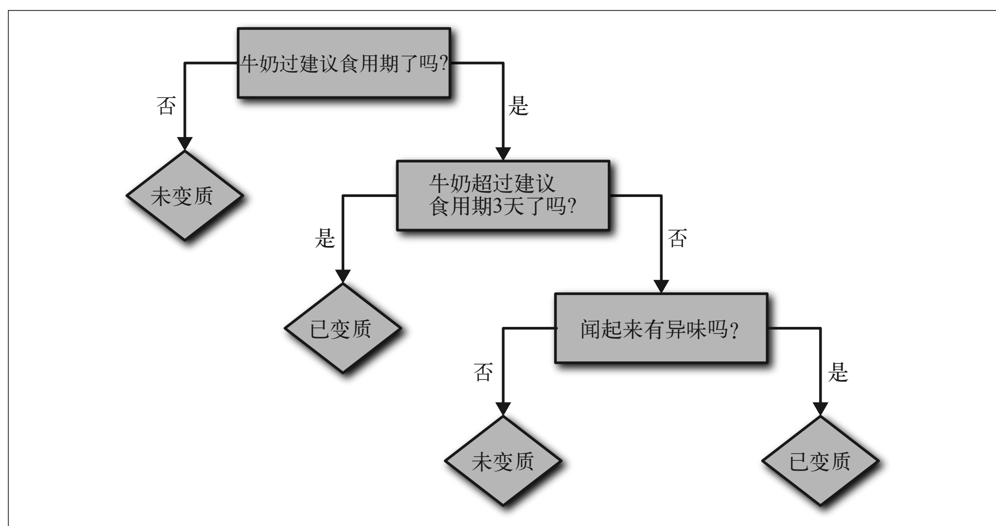


图 4-1：决策树：牛奶坏了吗？

前面提到的规则是我在上大学期间学会的，很直观。这些规则不但简单而且能有效地帮我区分牛奶是否已经坏了。这些都是一棵好的决策树的特点。

上面是一棵简化的决策树，构造过程非常灵活。为了更详细地说明决策树，我们来看看另外一个例子。在一个新奇的宠物店，一个机器人正忙于工作。在宠物店开门营业之前，它要学会什么动物适合成为孩子们的宠物。在开始之前，店长给出了 9 种宠物，其中有的适合做宠物，有的不适合。经过一番检查，机器人把这些信息编撰成一张表格，如表 4-1 所示。

表4-1：新奇宠物店的“特征向量”

名　　字	重量（公斤）	腿　　数	颜　　色	适合做宠物吗
Fido	20.5	4	棕色	是
Mr. Slither	3.1	0	绿色	否
Nemo	0.2	0	棕黄色	是
Dumbo	1390.8	4	灰色	否
Kitty	12.1	4	灰色	是
Jim	150.9	2	棕黄色	否
Millie	0.1	100	棕色	否
McPigeon	1.0	2	灰色	否
Spot	10.0	4	棕色	是

虽然数据中已经给定了名字，但名字并不能作为一个特征。我们没有道理认为名字本身具有预测性：就机器人所知，“Felix”可能是只猫的名字，也可能是只有毒的狼蛛。因此，这里所剩的特征有：两个数值型特征（重量、腿数），一个类别型特征（颜色），这三个特征用来预测一个类别型目标（是否适合做小孩的宠物）。

机器人可能会用一个简单的决策树拟合训练数据集，这棵决策树只根据“重量”做决策，如图 4-2 所示。

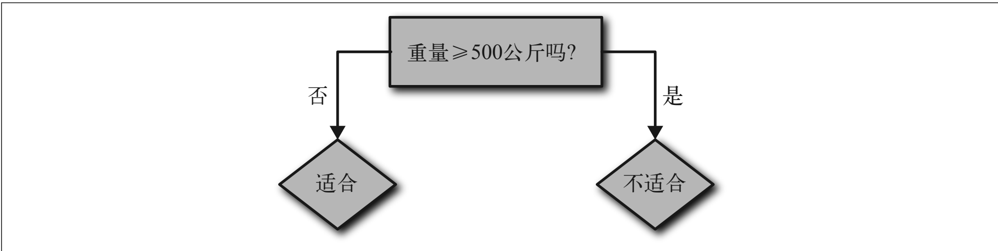


图 4-2：机器人的第一棵决策树

决策树逻辑很好理解，而且有一定的道理：500 公斤的动物肯定不适合作宠物。这条规则能对 9 个样本中的 5 个作出正确预测。快速看一下训练数据，我们就能发现把重量的阈值降低为 100 公斤能够改进决策规则。这样我们就能正确预测 6 个样本。现在重量大的动物都能预测正确了，但重量轻的动物只能部分预测正确。

因此，为了进一步提高对体重小于 100 公斤的动物的预测准确度，机器人进行了第二次决策。如果能找到一个特征，通过这个特征将错误的“是”预测纠正为“否”预测，那就太好了。比如，训练集中有一种小型的绿色动物，听起来有点儿像条蛇，不适合做宠物，机器人就可以根据颜色对此作出正确判断，如图 4-3 所示。

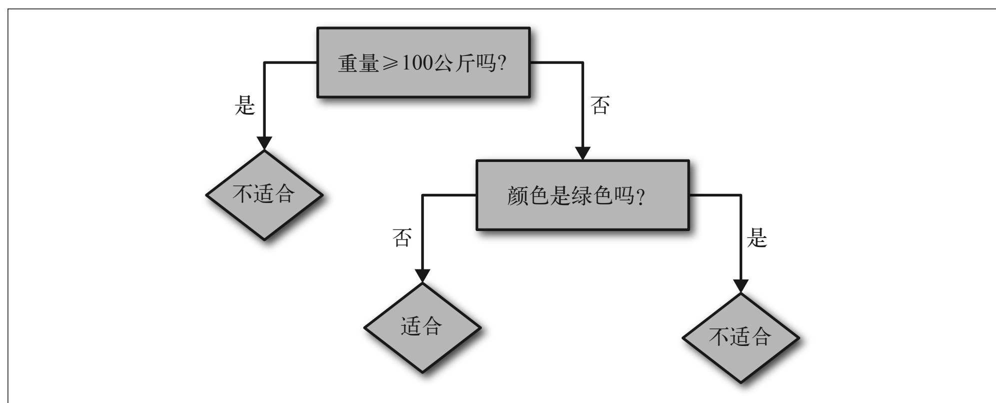


图 4-3：机器人的第二棵决策树

现在 9 个样本中有 7 个可以正确预测。当然，可以一直增加决策规则，直到对所有 9 个样本都能全部正确地作出预测。但这样得出的决策树很可能不合理，如果翻译成常用语，决策树可能是：“如果动物的重量小于 100 公斤，并且颜色是棕色而不是绿色，并且腿的数量少于 10，那么它适合做宠物。”虽然能完美拟合给定样本，但这样的决策树不能预测出棕色有四条腿的小型豹熊不合适做宠物。看来，为避免这种被称为过度拟合的现象，还是需要继续改进啊。

不过到目前为止，对决策树算法的介绍已经足够我们在 Spark 中使用决策树算法了。本章接下来的内容将描述怎样选择决策规则，何时停止决策过程以及怎样通过创建决策森林来提高准确度。

4.5 Covtype数据集

本章用到的数据集是著名的 Covtype 数据集，该数据集可以在线下载（https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/covtype），包含一个 CSV 格式的压缩数据文件 covtype.data.gz，附带一个描述数据文件的信息文件 covtype.info。

该数据集记录了美国科罗拉多州不同地块的森林植被类型（也就是现实中的森林，这仅仅是巧合！）每个样本包含了描述每块土地的若干特征，包括海拔、坡度、到水源的距离、遮阳情况和土壤类型，并且随同给出了地块的已知森林植被类型。我们需要总共 54 个特征中的其余各项来预测森林植被类型。

人们已经用该数据集进行了研究，甚至在 Kaggle 大赛（https://www.kaggle.com/c/forest-cover-type-prediction）中也用过它。本章之所以研究这个数据集，原因在于它不但包含了数值型特征而且包含了类别型特征。该数据集有 581 012 个样本，虽然还称不上大数据，但作为一个范例来已经足够大，而且也能够反映出大数据上的一些问题。

4.6 准备数据

幸运的是，数据已经是简单的 CSV 格式了。在开始用 Spark 的 MLlib 之前，我们不需要进行大量的清洗或其他准备工作。后面我们将介绍如何对数据做一些转换，但现在该数据集可以直接开始用。

解压 covtype.data 文件并复制到 HDFS。本章我们假定文件放在 /user/ds/ 目录下。请启动 `spark-shell`。

Spark MLlib 将特征向量抽象为 `LabeledPoint`，它由一个包含多个特征值的 Spark MLlib `Vector` 和一个称为标号（label）的目标值组成。该目标为 `Double` 类型，而 `Vector` 本质上是对多个 `Double` 类型值的抽象。这说明 `LabeledPoint` 只适用于数值型特征。但只要经过适当编码，`LabeledPoint` 也可用于类别型特征。

其中一种编码是 one-hot（http://en.wikipedia.org/wiki/One-hot）或 1-of-*n* 编码。在这种编码中，一个有 *N* 个不同取值的类别型特征可以变成 *N* 个数值型特征，变换后的每个数值型特征的取值为 0 或 1。在这 *N* 个特征中，有且只有一个取值为 1，其他特征取值都为 0。比如，类别型特征“天气”可能的取值有“多云”“有雨”或“晴朗”。在 1-of-*n* 编码中，它就变成了三个数值型特征：多云用 `1,0,0` 表示，有雨用 `0,1,0` 表示，晴朗用 `0,0,1` 表示。可以为这三个数值型特征分别取名：`is_cloudy`、`is_rainy` 和 `is_clear`。

另一种可能的编码方式是为类别型特征的每个可能取值分配一个不同数值，比如多云 1.0，有雨 2.0 等。



在编码过程中，将类别型特征当成数值型特征时要小心。类别型特征值原本是没有大小顺序可言的，但被编码为数值之后，它们就“显得”有大小顺序了。被编码后的特征若被视为数值，算法在一定程度上会假定有雨比多云大，而且大两倍，这样就可能导致不合理的结果。当然，只要算法不把数字编码当作数值来用也没什么问题。

虽然 Covtype 数据集所有列都是数值，但从本质上讲，该数据集并不是完全由数值型特征组成。covtype.info 文件显示，有 4 列是由同一个类别型特征 `Wilderness_Type` 经过 one-hot 编码生成的，它被赋予了 4 个可能的取值。同样，还有 40 列也是同一个类别型特征 `Soil_Type`。目标本身也是类别型值，用 1 到 7 编码。其余的才是由不同单位度量的数值型特征，

比如米、度或某个定性的指标值。

在 Covtype 数据集中，我们看到它同时使用了前面提到的类别型变量的两种编码方法。如果对类别型特征不用这两种编码方式，而是直接使用类似“Rawah Wilderness Area”这样的值，有可能会更简单更直接。这可能是历史的产物：Covtype 数据集在 1998 年发布。基于性能方面的考虑，或者为了满足当时处理工具要求的格式（当时工具更多是面向回归问题的），数据集往往用这样的方式进行编码。

4.7 第一棵决策树

开始时我们原样使用数据。决策树（`DecisionTree`）的实现，以及 Spark MLlib 中其他几个实现，都要求输入必须是 `LabeledPoint` 对象格式：

```
import org.apache.spark.mllib.linalg._
import org.apache.spark.mllib.regression._

val rawData = sc.textFile("hdfs:///user/ds/covtype.data")

val data = rawData.map { line =>
  val values = line.split(',').map(_.toDouble)
  val featureVector = Vectors.dense(values.init) ❶
  val label = values.last - 1 ❷
  LabeledPoint(label, featureVector)
}
```

❶ `init` 返回除最后一个值之外的所有值；最后一列是目标。

❷ 决策树要求 `label` 从 0 开始，所以要减 1。

第 3 章从所给数据中快速地建立了一个推荐模型。大家可以借助一些音乐知识凭感觉就能对这个推荐引擎作一些判断：只要对比看看用户的收听习惯和引擎推荐的艺术家，就能大概知道推荐引擎给出的推荐还不错。但在这里这样做却是不可能的。我们既不知道怎样用 54 个特征来描述科罗拉多州的一个从未见过的地块，也不知道如何预测这样地块上的森林植被类型。

相反，我们可以直接从数据集中取出部分数据，用以评估所得到的模型。之前，为了评价保留的收听数据和模型预测之间的一致性，我们采用 AUC 指标。这里我们采用同样的原理，不过评价指标改为*精确度*指标。本章将数据分成完整的三部分：训练集、交叉检验集（CV）和测试集。在下面的代码中你会看到，训练集占 80%，交叉检验集和测试集各占 10%：

```
val Array(trainData, cvData, testData) =
  data.randomSplit(Array(0.8, 0.1, 0.1))
trainData.cache()
cvData.cache()
testData.cache()
```

和 ALS 实现一样，DecisionTree 实现也有几个超参数，我们需要为它们选择值。和之前一样，训练集和 CV 集用于给这些超参数选择一个合适值。这里第三个数据集，也就是测试集，用于对基于选定超参数的模型期望准确度做无偏估计。模型在交叉检验集上的准确度往往有点儿过于乐观，不是无偏差的。本章我们将更进一步，以此在测试集上评估最终模型。

但是现在我们还是先来试试在训练集上构造一个 DecisionTreeModel 模型，参数采用默认值，并用 CV 集来计算结果模型的指标：

```
import org.apache.spark.mllib.evaluation._
import org.apache.spark.mllib.tree._
import org.apache.spark.mllib.tree.model._
import org.apache.spark.rdd._

def getMetrics(model: DecisionTreeModel, data: RDD[LabeledPoint]):
    MulticlassMetrics = {
  val predictionsAndLabels = data.map(example =>
    (model.predict(example.features), example.label)
  )
  new MulticlassMetrics(predictionsAndLabels)
}

val model = DecisionTree.trainClassifier(
  trainData, 7, Map[Int,Int](), "gini", 4, 100)

val metrics = getMetrics(model, cvData)
```

这里我们用 trainClassifier，而不用 trainRegressor，trainClassifier 指示每个 LabeledPoint 里的目标都应该当作不同的类别标号，而不是数值型特征值。（对于回归问题 trainRegressor 情况类似，本章不再单独讨论。）

示例代码中，我们必须指明数据集中目标的取值个数，也就是 7。Map 保存类别型特征的信息，后面在解释参数值 gini、最大深度 4 和最大桶数 100 的含义时我们一并讨论。

MulticlassMetrics 以不同方式计算分类器预测质量的标准指标，这里分类器运行在 CV 集上。理想情况下，分类器对 CV 集中每个样本的目标类别应该都能做出正确预测。这里的指标以不同方式度量这种正确性。

和 MulticlassMetrics 一起，Spark 还提供了 BinaryClassificationMetrics。它提供类似 MulticlassMetrics 的评价指标实现，不过仅适用常见的类别型目标只有两个可能取值的情况。由于这里目标类别的可能取值有多个，所以我们不能直接使用 BinaryClassificationMetrics。

我们有必要先看看混淆矩阵：

```
metrics.confusionMatrix

...
14019.0  6630.0   15.0    0.0    0.0  1.0   391.0
5413.0   22399.0  438.0   16.0   0.0  3.0   50.0
0.0      457.0    2999.0  73.0   0.0  12.0  0.0
0.0      1.0      163.0   117.0  0.0  0.0   0.0
0.0      872.0    40.0    0.0    0.0  0.0   0.0
0.0      500.0    1138.0  36.0   0.0  48.0  0.0
1091.0   41.0     0.0     0.0    0.0  0.0   891.0
```



你得到的值可能稍有不同。构造决策树过程中的一些随机选项会导致分类结果稍有不同。

因为目标类别的取值有 7 个，所以混淆矩阵是一个 7×7 的矩阵，矩阵每一行对应一个实际的正确类别值，矩阵每一列按序对应预测值。第 i 行第 j 列的元素代表一个正确类别为 i 的样本被预测为类别为 j 的次数。因此，对角线上的元素代表预测正确的次数，而其他元素则代表预测错误的次数。对角线上的次数多是好的。但也确实出现了一些分类错误的情况，比如分类器甚至没有将任何一个样本类别预测为 5。

将准确度用一个数字概括是有帮助的。显然，我们可以想到用预测正确的样本数占整个样本数的比例来计算准确度：

```
metrics.precision

...
0.7030630195577938
```

大约 70% 样本的分类是正确的。这个比例通常被称为*准确度*（accuracy），在 Spark 的 `MulticlassMetrics` 指标中称为*精确度*（precision），意思差不多。

实际上*精确度*（precision）是二元分类问题中一个常用的指标。二元分类问题中的目标类别只有两个可能的取值，而不是多个取值，其中一个类代表正，另一类代表负，精确度就是被标记为“正”而且确实是“正”的样本占所有标记为“正”的样本的比例。和精确度一起出现的还有另一个指标*召回率*（recall）。召回率是被分类器标记为“正”而且确实为“正”的样本与所有本来就是“正”的样本的比率。

比如，假设数据集有 50 个样本，其中 20 个为正。分类器将 50 个样本中的 10 个标记为“正”，在这 10 个被标记为“正”的样本中，只有 4 个确实是“正”（也就是 4 个分类正确），所以这里的精确度为 4/10=0.4，召回率为 4/20=0.2。

我们可以把这些概念应用到多元分类问题，把每个类别单独视为“正”，所有其他类型视为

"负"。比如，要计算每个类别相对其他类别的精确度，请看如下代码：

```
(0 until 7).map( ❶
  cat => (metrics.precision(cat), metrics.recall(cat))
).foreach(println)

...
(0.6805931840866961,0.6809492105763744)
(0.7297560975609756,0.7892237892589596)
(0.6376224968044312,0.8473952434881087)
(0.5384615384615384,0.3917910447761194)
(0.0,0.0)
(0.7083333333333334,0.0293778801843318)
(0.6956168831168831,0.42828585707146427)
```

❶ DecisionTreeModel 模型的类别标号从 0 开始。

由此可以看到每个类型的准确度都各不相同。就本例而言，我们没道理认为某个类型的准确度要比其他类型的准确度更重要，因此用一个多元分类的总体精确度就可以较好地度量分类准确度。

虽然 70% 的准确度听起来还不错，但我们还不能立马看出这个准确度是优秀还是糟糕。作为基准，一个朴素方法的准确度是多少呢？即使是一个坏了的时钟，每天也会有两次显示的时间是正确的。类似地，为每个样本随便猜一个类别，偶尔也能得到正确答案。

按照类别在训练集中出现的比例来预测类别，我们来构建一个"分类器"。每次分类的正确度将和一个类型在 CV 集中出现的次数成正比。比如，一个类别在训练集中占 20%，在 CV 集中占 10%，那么该类别将贡献 10% 的 20%，即 2% 的总体准确度。通过按 20% 的时候将样本猜测为该类，CV 集样本中有 10% 的样本会被猜对。将所有类别在训练集和 CV 集出现的概率相乘，然后把结果相加，我们就得到了一个对准确度的评估：

```
import org.apache.spark.rdd._

def classProbabilities(data: RDD[LabeledPoint]): Array[Double] = {
  val countsByCategory = data.map(_.label).countByValue() ❶
  val counts = countsByCategory.toArray.sortBy(_._1).map(_._2) ❷
  counts.map(_.toDouble / counts.sum)
}

val trainPriorProbabilities = classProbabilities(trainData)
val cvPriorProbabilities = classProbabilities(cvData)
trainPriorProbabilities.zip(cvPriorProbabilities).map { ❸
  case (trainProb, cvProb) => trainProb * cvProb
}.sum

...
0.37737764750734776
```

❶ 计算数据中每个类别的样本数：(类别，样本数)。

❷ 对类别的样本数进行排序并取出样本数。

❸ 把训练集和 CV 集中的某个类别的概率结成对，相乘然后相加。

随机猜测的准确度为 37%，所以我们前面得到 70% 的准确度看起来还不错。但是这个 70% 的准确度是在 `DecisionTree.trainClassifier()` 中用默认参数的条件下取得的。如果在决策树构建过程中试试超参数的其他值，准确度还可以提高。

4.8 决策树的超参数

第 3 章中，ALS 算法提供了几个超参数。我们先构造超参数取不同值时的不同组合的模型，然后用某个指标评估每个组合结果的质量，通过这种方式来选择超参数值。这里我们采用相同的过程，但指标由 AUC 改为多元分类准确度。这里控制决策树选择过程的超参数为最大深度、最大桶数和不纯性度量。

最大深度只是对决策树的层数作出限制，它是分类器为了对样本进行分类所作的一连串判断的最大次数。限制判断次数有利于避免对训练数据产生过拟合，这一点我们在前面宠物店的例子中已有说明。

决策树算法负责为每层生成可能的决策规则，比如在宠物店示例中，这些决策规则类似“重量≥ 100”或者“重量≥ 500”。决策总是采用相同形式：对数值型特征，决策采用特征≥值的形式；对类别型特征，决策采用特征在（值 `1`，值 `2`，…）中的形式。因此，要尝试的决策规则集合实际上是可以嵌入决策规则中的一系列值。Spark MLlib 的实现把决策规则集合称为“桶”（bin）。桶的数目越多，需要的处理时间越多但找到的决策规则可能更优。

什么因素会促使产生好的决策规则？直观上讲，好的决策规则应该通过目标类别值对样本作出有意义的划分。比如，如果一个规则将 Covtype 数据集划分为两个子集，其中一个子集的样本全部属于类别 1~3，第二个子集中的样本则都属于和类别 4~7，那么它就是一个好规则，因为这个规则清楚地把一些类别和其他类别分开。如果样本集用一个决策规则划分，划分前后每个集合各类型的不纯性程度没有改善，那么这个规则就没什么价值。沿着该决策规则的分支走下去，每个目标类别的可能取值的分布仍然是一样的，因此实际上它在构造可靠的分类器方面没有任何进步。

换句话说，好规则把训练集数据的目标值分为相对是同类或“纯”（pure）的子集。选择最好的规则也就意味着最小化规则对应的两个子集的不纯性（impurity）。不纯性有两种常用的度量方式：Gini 不纯度（http://en.wikipedia.org/wiki/Decision_tree_learning#Gini_impurity）或熵（http://en.wikipedia.org/wiki/Entropy_(information_theory)）。

Gini 不纯度直接和随机猜测分类器的准确度相关。在每个子集中，它就是对一个随机挑选

的样本进行随机分类时分类错误的概率（随机挑选样本和随机分类时要参照子数据集的类别分布）。这就是用 1 减去每个类别的比例与自身的乘积之和。假设子数据集包含 N 个类别的样本，p_i 是类别 i 的样本所占比例，于是可以得到如下 Gini 不纯度公式：

$$I_G(p)=1-\sum_{i=1}^{N}p_i^2$$

如果子数据集中所有样本都属于一个类别，则 Gini 不纯度的值为 0，因为这个子数据集完全是“纯”的。当子数据集中的样本来自 N 个不同的类别时，Gini 不纯度的值大于 0，并且在每个类别的样本数都相同时达到最大，也就是最不纯的情况。

熵是另一种度量不纯性的方式，它来源于信息论。解释熵的本质更困难，但熵代表了子集中目标取值集合的不确定程度。如果子集只包含一个类别，则是完全确定的，熵为 0。熵可以用以下熵计算公式定义：

$$I_E(p)=\sum_{i=1}^{N}p_i\log\left(\frac{1}{p}\right)=-\sum_{i=1}^{N}p_i\log(p_i)$$

有意思的是，不确定性是有单位的。由于取自然对数（以 e 为底），熵的单位是*纳特*（nat）。相对于以 e 为底的纳特，我们更熟悉它对应的*比特*（以 2 为底取对数即可得到）。它实际上度量的是信息，因此在使用熵的决策树中，我们也常说决策规则的*信息增益*。

不同的数据集上对于挑选好的决策规则方面，这两个度量指标各有千秋。Spark 的实现默认采用 Gini 不纯度。

有些决策树实现会对候选决策规则设定最小信息增益，或最小不纯度降低。在改善子集合的不纯性方面不达标的决策规则将不被采用。与通过减少最大深度一样，这也有利于避免过拟合，因为对训练集没有什么区分度的决策规则实际上对区分将来的数据也没什么帮助。然而，Spark MLlib 目前还没有实现最小信息增益之类的规则。

4.9　决策树调优

采用哪个不纯性度量所得到的决策树的准确度更高，或者最大深度或桶数取多少合适，从数据上看，回答这些问题是困难的。幸运的是，我们可以让 Spark 来尝试这些值的许多组合并报告结果，就像第 3 章所做的那样：

```
val evaluations =
  for (impurity <- Array("gini", "entropy");
       depth    <- Array(1, 20);
       bins     <- Array(10, 300)) ❶
    yield {
      val model = DecisionTree.trainClassifier(
        trainData, 7, Map[Int,Int](), impurity, depth, bins)
```

```
      val predictionsAndLabels = cvData.map(example =>
        (model.predict(example.features), example.label)
      )
      val accuracy =
        new MulticlassMetrics(predictionsAndLabels).precision
      ((impurity, depth, bins), accuracy)
    }

evaluations.sortBy(_._2).reverse.foreach(println) ❷

...
((entropy,20,300),0.9125545571245186)
((gini,20,300),0.9042533162173727)
((gini,20,10),0.8854428754813863)
((entropy,20,10),0.8848951647411211)
((gini,1,300),0.6358065896448438)
((gini,1,10),0.6355669661959777)
((entropy,1,300),0.4861446298673513)
((entropy,1,10),0.4861446298673513)
```

❶ 和第三章一样，可以看成是三重 for 循环。

❷ 根据第二个值（准确度）降序排序并打印。

很显然最大深度为 1 太小，得到的结果比较差。桶数多有点儿帮助，但帮助也不大。在合理的最大深度下，两个不纯性度量的结果也差不多。我们可以继续这个过程来探寻更好的超参数。桶数应该越多越好，但会减慢模型构造过程且增加内存的使用量。在所有情况下我们都应该试试两种不纯性度量。增加最大深度能提高准确度，但这里有个拐点，超过它之后增加深度也没有用了。

到目前为止，本章示例代码一直都没用到占数据集 10% 的保留测试集。如果说 CV 集的目的是评估适合*训练集*的*参数*，那么测试集的目的是评估适合 CV 集的*超参数*。也就是说，测试集保证了对最终选定的超参数及模型准确度的无偏估计。

前面的测试表明，目前为止超参数的最佳选择是：不纯性度量采用熵，最大深度为 20，桶数为 300，这时得到的准确度为 91.2%。但是，模型在构建过程中还有一个随机元素。最好的模型和评估结果可能还需要一点儿运气的成分，因此准确度评估可能有一些乐观。换句话说，超参数也可能有过拟合现象。

要想真正评估这个最佳模型在将来的样本上的表现，当然需要在没有用于训练的样本上进行评估。但是，我们也需要避免使用在评估环节中用过的 CV 集样本。这也就是需要把第三个子集即测试集保留在一边的原因。最后一步，用得到的超参数同时在训练集和 CV 集上构造模型并且像前面那样进行评估：

```
val model = DecisionTree.trainClassifier(
  trainData.union(cvData), 7, Map[Int,Int](), "entropy", 20, 300)
```

结果准确度为 91.6%，基本上没变。因此，开始的估计看来是可靠的。

现在该重新回顾一下过拟合的问题了。如前所述，我们可能构造这样一棵决策树：它的深度非常深，非常复杂，它能很好地甚至是完美拟合给定的训练样本，但却不能把这种准确度推广到其他样本上，因为它过于紧密地拟合了训练样本中的细微特质和噪声。过拟合问题不只是在决策树算法中存在，而是大多数机器学习算法普遍存在的问题。

当决策树有过拟合问题时，在与模型拟合相同的训练数据上它的准确度很高，但在其他样本上准确度很低。在本章示例中，最终模型在其他新样本上的准确度大约为 91.6%。当然，通过 `trainData.union(cvData)`，我们就能轻易在训练数据上评估准确度。这时的准确度大约为 95.3%。

差别不是很大，但也显示决策树在一定程度上存在对训练数据的过拟合。减小最大深度可能会使过拟合问题有所改善。

4.10 重谈类别型特征

到目前为止我们还没有对示例代码中的参数 `Map[Int,Int]()` 作出解释。这个参数值，比如 7，指明了输入数据中每个类别型特征预期的不同取值的个数。这个 `Map` 中元素的键是特征在输入向量 `Vector` 中的下标，`Map` 中元素的值是类别型特征的不同取值个数。目前 Spark MLlib 实现中要求事先给定这些信息。

参数取为空 `Map()`，则表示算法不需要把任何特征作为类别型，也就是说所有特征都是数值型的。实际上，Spark MLlib 实现中所有特征都是数值，但概念上其中某些是类别型特征。如前所述，如果简单地把类别型变量当作数值型对待，将其映射到不同的数字，这种做法是错误的，原因在于算法会试图从一个没有意义的大小顺序中学习。

好在，这里的类别型特征已经用 one-hot 方式编码成了多个二元的 0/1 值。把这些单个的特征当作数值型来处理并没有什么问题，因为任何基于数值型特征的决策规则都需要选择 0 或 1 作为其阈值，由于所有的阈值都是 0 或 1，所以都是等价的。

当然，这种编码迫使决策树算法在底层要单独考虑类别型特征的每一个值。如果用一个类别型变量就不会有这个方面的限制。如果某个类别型特征有 40 个取值，决策树可以在一次决策中对多个类别组进行判断。这样的方式更直接更优。另一方面，用 40 个数值型特征表示一个有 40 个取值的类别型特征会增加内存使用量并且减慢决策速度。

如果取消数据集已经完成的 one-hot 编码，情况会怎样？下面我们试试解析输入，将 one-hot 编码所得到的两个类别型特征转换回一系列不同的数值型值：

```
val data = rawData.map { line =>
  val values = line.split(',').map(_.toDouble)
  val wilderness = values.slice(10, 14).indexOf(1.0).toDouble ❶
  val soil = values.slice(14, 54).indexOf(1.0).toDouble ❷
```

```
    val featureVector =
      Vectors.dense(values.slice(0, 10) :+ wilderness :+ soil) ❸
    val label = values.last - 1
    LabeledPoint(label, featureVector)
  }
```

❶ “wilderness”对应的 4 个二元特征中哪一个取值为 1。

❷ 类似地，“soil”对应 40 个二元特征。

❸ 将推导出的特征加回到前 10 个特征中。

我们可以重复将数据集拆分成训练集 /CV 集 / 测试集和模型评估的过程。这里，我们指定两个新的类别型特征的不同取值个数，这样这两个特征就会被当作类别型而不是数值型特征处理。由于地块（soil）特征有 40 个不同的取值，`DecisionTree` 需要桶数目最少增加到 40。考虑前面的结果，增加决策树的深度直至 30，30 是当前 `DecisionTree` 能支持的最大深度。最后，在训练集和 CV 集上的准确度报告如下：

```
val evaluations =
  for (impurity <- Array("gini", "entropy");
       depth    <- Array(10, 20, 30);
       bins     <- Array(40, 300))
    yield {
      val model = DecisionTree.trainClassifier(
        trainData, 7, Map(10 -> 4, 11 -> 40),
        impurity, depth, bins) ❶
      val trainAccuracy = getMetrics(model, trainData).precision
      val cvAccuracy = getMetrics(model, cvData).precision
      ((impurity, depth, bins), (trainAccuracy, cvAccuracy)) ❷
    }

...
((entropy,30,300),(0.9996922984231909,0.9438383977425239))
((entropy,30,40),(0.9994469978654548,0.938934581368939))
((gini,30,300),(0.9998622874061833,0.937127912178671))
((gini,30,40),(0.9995180059216415,0.9329467634811934))
((entropy,20,40),(0.9725865867933623,0.9280773598540899))
((gini,20,300),(0.9702347139020864,0.9249630062975326))
((entropy,20,300),(0.9643948392205467,0.9231391307340239))
((gini,20,40),(0.9679344832334917,0.9223820503114354))
((gini,10,300),(0.7953203539213661,0.7946763481193434))
((gini,10,40),(0.7880624698753701,0.7860215423792973))
((entropy,10,40),(0.78206336500723,0.7814790598437661))
((entropy,10,300),(0.7821903188046547,0.7802746137169208))
```

❶ 指定类别型特征 10 和 11 的取值个数。

❷ 返回在训练集和 CV 集上的准确度。

如果在集群上运行以上代码，会发现决策树构建过程比之前快了好几倍。

在深度为 30 的时候，训练集几乎完美拟合。这时虽然存在一定程度的过拟合，但是在交

叉检验集上的准确度是最高的。选择熵作为不纯性度量和更多的桶数目，再一次看起来有助于提高准确度。在本次测试集上，准确度为 94.5%。通过把类别型特征真正作为类别型，分类器的准确度提高了将近 3%。

4.11 随机决策森林

如果你一步一步运行本章示例代码，可能已经注意到运行结果和本书代码中给出的结果稍有不同。这是在决策树构建过程中由随机因素造成的，在决定采用什么数据和尝试哪些决策规则时都有这些随机因素的影响。

在决策树的每层，算法并不会考虑所有可能的决策规则。如果在每层上都要考虑所有可能的决策规则，算法的运行时间将无法想象。对一个有 N 个取值的类别型特征，总共有 2^N-2 个可能的决策规则（除空集和全集以外的所有子集）。即使对于一个一般大的 N，这也将创建数十亿候选决策规则。

相反，决策树使用一些启发式策略，能够聪明地找到需要实际考虑的少数规则。在选择规则的过程中也涉及一些随机性；每次只考虑随机选择少数特征，而且只考虑训练数据中一个随机子集。在牺牲一些准确度的同时换回了速度的大幅提升，但也意味着每次决策树算法构造的树都不相同。这是件好事。

因为集体的智慧常常比个体预测要更准确。

为了说明问题，我们来做个快速测验：伦敦运营的黑色的士数量有多少？

请猜一下，先不要偷看答案。

正确答案是约 19 000，我猜 10 000，这离正确答案差了很多。因为我猜的数比较小，所以你有可能猜的比我大，这样我们平均一下就可能更准确了。这里貌似又有点儿“趋均值回归”的味道了。我随便问了办公室里的 13 个人，大家的平均值是 11 170，这个答案确实要更接近正确答案。

要取得这种效应，关键是每个人猜的时候要独立，互不影响。（你没偷看答案，是吧？）如果大家事先都已经统一过意见并用同一个方法猜，这个练习就没有意义了，因为大家猜的答案都一样，而且这个相同的答案可能错得离谱。如果在你猜之前，我把我的情况告诉你，这会影响你的猜测，那么咱俩的平均数可能并不会更准确，甚至会更糟。

基于上述考虑，最好树不只有一棵，而是应该有很多棵，每一棵都能对正确目标值给出合理、独立且互不相同的估计。这些树的集体平均预测应该比任一个体预测更接近正确答案。正是由于决策树构建过程中的*随机性*，才有了这种独立性，这就是随机决策*森林*的关键所在。

通过 RandomForest，Spark MLlib 可以构建随机决策森林。顾名思义，随机决策森林是由多个决策树独立构造而成。

```
val forest = RandomForest.trainClassifier(
  trainData, 7, Map(10 -> 4, 11 -> 40), 20,
  "auto", "entropy", 30, 300)
```

与 DecisionTree.trainClassifier() 相比，这里出现了两个新参数。第一个代表要构建多少棵树，这里是 20。由于要构造 20 棵决策树，而之前我们只构造了一棵决策树，因此这里模型构建过程耗时可能比之前长得多。

第二个新参数是特征决策树每层的评估特征选择策略，这里设为 "auto"（自动）。随机决策森林在实现过程中决策规则不会考虑全部特征，而只考虑全部特征的一个子集。特征选择策略参数控制算法如何选择该特征子集。只检查少数特征速度明显要快，并且由于速度快，随机决策森林才得以构造多棵决策树。

但是，只考虑全部特征的一个子集，这种做法也使个体决策树的决策更加独立，因此决策森林作为整体往往更不会产生过拟合问题。如果某个特征包含噪声数据，或只针对训练集有预测性，则这种预测性是有误导性质的。采用随机森林后大多数树在大多数时候将因此不会考虑这个问题特征。大多数的树将不会拟合噪声，因此它们的“票数”将超过那些拟合噪声的树。

实际上在构造决策森林的时候，每棵树甚至都没必要用到全部训练数据。同理，每棵树的输入数据可以随机选择。

随机决策森林的预测只是所有决策树预测的加权平均。对于类别型目标，这就是得票最多的类别，或有决策树概率平均后的最大可能值。随机决策森林和决策树一样也支持回归问题，这时森林作出的预测就是每棵树预测值的平均。

RandomForestModel 模型的准确度立刻变为 96.3%——提高了约 2%。换个角度看，比之前我们得到的最好决策树的错误率降低了 33%，错误率由 5.5% 降到了 3.7%。

在大数据的背景下，随机决策森林非常有吸引力，因为决策树往往是独立构造的，诸如 Spark 和 MapReduce 这样的大数据技术本质上适合数据并行问题。也就是说，总体答案的每个部分可以通过在部分数据上独立计算来完成。随机决策森林中决策树可以并且应该只在特征子集或输入数据子集上进行训练，基于这个事实，决策树构造的并行化就很简单了。

由于决策树通常在全体训练数据的一个子集上构造，可以用剩余数据对其进行内部交叉验证，因此随机决策森林也可以顺便评估其准确度，尽管 Spark MLlib 还没有对该功能提供直接支持。这意味着随机决策森林甚至能知道其内部哪棵决策树是最准确的，因而可以增加其权重。

这个特点也用于评估哪些输入特征对预测目标最有帮助，因此它有助于解决特征选择问题。但是，这个话题超出了本章的范围，并且 MLlib 目前也没有提供支持。

4.12 进行预测

构建分类器虽然有趣且简单，但它不是最终目的。我们的目的是利用它进行预测。我们之前的辛苦努力在这里将得到回报，而且做起来相对非常容易。训练集由 `LabeledPoint` 类型实例组成，每个实例包含一个 `Vector` 和目标值，它们分别是输入和已知的输出。波尔先生说，当进行预测时，特别是预测未来时，输出当然是未知的。

现在我们已经展现了 `DecisionTree` 和 `RandomForest` 训练的结果，它们分别是 `DecisionTreeModel` 和 `RandomForestModel` 对象。这两个模型对象本质上都只有一个方法 `predict()`。和 `LabeledPoint` 的特征向量部分一样，`predict()` 方法接受一个 `Vector`。因此通过把每个新样本转换成一个特征向量，我们同样可以对它进行分类并预测它的目标类别：

```
val input = "2709,125,28,67,23,3224,253,207,61,6094,0,29"
val vector = Vectors.dense(input.split(',').map(_.toDouble))
forest.predict(vector) ❶
```

❶ 同样我们可以一次性对整个 RDD 做预测。

结果应该为 4.0，对应原始 Covtype 数据集中的类别 5（原始特征从 1 开始）。显然，算法预测示例中讨论的地块植被类型为“山杨”（Aspen）。

4.13 小结

本章介绍了相互关联的两类重要的机器学习算法：分类和回归。我们还一同介绍了模型构造和调优的一些基本概念：特征、向量、训练和交叉检验。使用 Covtype 数据集和 Spark MLlib 中实现的决策树和决策森林算法，本章演示了如何根据位置和土壤类型等信息预测森林植被的类型。

和第 3 章一样，我们还可以进一步研究超参数对模型准确度的影响。在选择决策树超参数时，我们往往会为了更高的准确度而宁愿花费更长时间：增加桶和树的数目通常能得到更高的精度，但精度的提高在到达一定程度之后提高的幅度会越来越小。

本章构建的分类器结果非常准确。一般情况下，准确度超过 95% 是很难达到的。通常，通过包括更多特征，或将已有特征转换成预测性更好的形式，我们可以进一步提高准确度。在分类器模型的迭代式改进过程中，我们常常这样反复尝试。比如，对本章的数据集，距离地表水的水平和垂直距离这两个特征可以生成第三个特征：离地表水的直线距离。或者，如果能收集到更多数据，为了提高准确度，我们可能会尝试增加更多特征，比如土壤湿度。

当然，用 Covtype 数据集预测森林植被类型只是预测问题的一种类型，现实中我们还有其他的预测问题。比如，有些问题要求预测连续型的数值，而不是类别型值。对于这类回归问题，本章介绍的许多分析方法和代码照样适用，不过我们要使用 `trainRegressor()` 方法而不是本章中介绍的 `trainClassifier()`。

再者，分类和回归算法不只包括决策树和决策森林，Spark MLlib 实现的算法也不限于决策树和决策森林。对分类问题，Spark MLlib 提供的实现包括：

- 朴素贝叶斯（http://en.wikipedia.org/wiki/Naive_Bayes_classifier）
- 支持向量机（http://en.wikipedia.org/wiki/Support_vector_machine）
- 逻辑回归（http://en.wikipedia.org/wiki/Logistic_regression）

是的，你没看错，逻辑回归是一种分类技术。逻辑回归底层通过预测类别的连续型概率函数来进行分类。细节内容我们不必理解。

这些算法与决策树和决策森林很不相同。但是，其中许多元素还是一样的：它们接受一个 `LabeledPoint` 类型的 RDD 作为输入，需要通过将输入数据划分为训练集、交叉检验集和测试集来选择超参数。对这些其他算法，我们可以用相同的通用原理为分类和决策问题建模。

这些都是监督学习的例子。如果某些目标值或全部目标值都是未知的，情况又会怎样？下一章我们将对此探寻解决之道。

第5章

基于*K*均值聚类的网络流量异常检测

作者：**Sean Owen**

据我们所知，有“已知的已知”；有些事，我们知道我们知道。我们也知道，有“已知的未知”，也就是说，有些事，我们现在知道我们不知道。但是，同样存在“不知的不知”；有些事，我们不知道我们不知道。

——Donald Rumsfeld

分类和回归技术很强大，在机器学习领域被广泛研究。第4章我们讲述了如何用分类器预测未知值。这里有一点很关键：为了预测新数据的未知值，必须事先给定许多样本并且样本的目标值是已知的。分类器仅在数据科学家知道他们要寻找什么，并且可以提供大量包含输入及正确输出的样本数据的情况下才能发挥作用。由于在学习过程中，对每个输入样本都给出正确的输出值作为指导，所以分类和回归都属于监督学习技术（http://en.wikipedia.org/wiki/Supervised_learning）。

然而，在样本仅能给出部分正确输出甚至无法给出输出的情况下，分类和回归技术将无法使用。考虑到电子商务网站的情况，我们要按照购物习惯和偏好将顾客分组。这里输入特征是顾客的购买记录、点击记录和个人信息等，输出则是顾客所属的群体，其中可能有一群顾客时尚意识较强，还可能有一群更追求性价比。

现在要求你确定每个新顾客所属的目标群体。如果采用分类等监督学习技术，你可能很快就会发现缺乏先验知识的问题：“哪些顾客属于时尚意识较强”这个信息是没有的。“时尚

意识较强”这个顾客群组对电子商务网站是否有意义，你甚至都不确定。

这时我们就要用到非监督学习技术了！因为目标值是未知的，所以非监督学习技术不会学习如何预测目标值。但是，它可以学习数据的结构并找出相似输入的群组，或者学习哪些输入类型可能出现，哪些类型不可能出现。本章将通过 MLlib 实现的聚类算法来介绍非监督学习技术。

5.1 异常检测

顾名思义，异常检测就是要找出不寻常的情况。如果已经知道“异常”代表什么涵义，我们就能通过监督学习轻松地检测出数据集中的异常。在样本的输入被标记为“正常”和“异常”后，算法就能通过学习样本来区分“正常”和“异常”了。然而本质上异常属于“未知的未知”，也就是说，在我们观察并理解了异常以后，它就不再是异常了。

异常检测常用于检测欺诈、网络攻击、服务器及传感设备故障。在这些应用中，我们要能够找出以前从未见过的新型异常，如新欺诈方式、新入侵方法或新服务器故障模式。

这些应用要用到非监督学习技术，通过学习，它们知道什么是正常输入，因此能够找出与历史数据有差异的新数据。这些新数据不一定是攻击或欺诈，它们只是不同寻常，因此值得我们做进一步的调查。

5.2 *K*均值聚类

聚类是最有名的非监督学习算法，它试图找到数据中的自然群组。一群互相相似而与其他点不同的数据点往往属于代表某种意义的一个簇群，聚类算法就是要把这些相似的数据划分到同一簇群中。

K 均值聚类（http://en.wikipedia.org/wiki/K-means_clustering）是应用最广泛的聚类算法。它试图在数据集中找出 *k* 个簇群，这里 *k* 值由数据科学家指定。*k* 是模型的超参数，其最优值与数据集本身有关。事实上，本章的一个关键点就是如何选择合适的 *k* 值。

对客户活动或交易数据集来说，“相似”到底代表什么？*K* 均值算法有个数据点相距多远的概念。在 *K* 均值算法中数据点相互距离一般采用欧氏距离。截至本书撰写时，欧氏距离是 Spark MLlib 中支持的唯一距离度量。计算欧氏距离时要求数据点的特征都是数值型。数据点“相似”就是指它们相互间的距离小。

在 *K* 均值算法中簇群其实就是一个点，即组成该簇的所有点的中心。数据点其实就是由所有数值型特征组成的特征向量，简称向量。因为在欧氏空间中向量被当成了点，所以直接把数据点看成点会更加直观。

簇群的中心称为*质心*（centroid），它是簇群中所有点的算术平均值，因此算法取名 K 均值。算法开始时选择一些数据点作为簇群的质心。然后把每个数据点分配给最近的质心。接着对每个簇计算该簇所有数据点的平均值，并将其作为该簇的新质心。然后不断重复这个过程。

对 K 均值算法的介绍到此为止，还有值得注意的一些细节内容，我们将在接下来的案例部分再做论述。

5.3 网络入侵

现在，网络攻击越来越多地见诸报端。有些攻击试图通过产生大量网络流量来阻塞计算机上的合法流量。其他一些攻击则试图利用网络软件的缺陷以实现对该计算机的非法访问。虽然识别流量“轰炸”式入侵方式十分简单，但要识别第二种入侵方式则无异于大海捞针。

有些入侵方式的模式是已知的。比如，连续不断地访问某个机器的所有端口，而正常的软件程序是不会这么做的。这往往是攻击的第一步，其目的是要找到计算机上有哪些可能被攻破的服务。

统计对各个端口在短时间内被远程访问的次数，就可以得到一个特征，该特征可以很好地预测端口扫描攻击。如果这种访问次数不多，则属于正常情况；但如果短时间内有好几百个访问，则属于攻击行为。这种方法也适用于其他从网络连接特征中预测网络攻击，这些特征包括发送与接收的字节数和 TCP 错误数等。

但如何处理那些“未知的未知”？最大的威胁可能就来自从未被识别和分类的情况。检测潜在网络入侵就是要识别这些异常，我们并不知道这些连接是不是攻击，但是它们和以往见过的连接都不同。

这里我们可以利用 K 均值之类的非监督学习技术来识别异常网络连接。K 均值可以根据每个网络连接的统计属性进行聚类。从个体上来看结果簇群是没有意义的，但从整体上看，结果簇群定义了历史连接的类型。因此簇群帮助我们界定了正常连接的区域，任何在区域之外的点都是不正常的，因而也就可能属于异常情况。

5.4 KDD Cup 1999数据集

KDD Cup（http://www.sigkdd.org/kddcup/index.php）是一项数据挖掘竞赛，每年由 ACM 特别兴趣小组举办。KDD Cup 每年都给出一个机器学习问题和相关数据集，研究人员应邀提交论文，论文将详细说明研究人员各自就该机器学习问题给出的最佳方案。KDD Cup 与之前的 Kaggle 竞赛（http://www.kaggle.com/）类似。1999 年（http://www.sigkdd.org/kdd-cup-

1999-computer-network-intrusion-detection）KDD Cup 竞赛的主题是网络入侵，今天我们仍然可以拿到当时的数据集（http://kdd.ics.uci.edu/databases/kddcup99/kddcup99.html）。本章基于 KDD Cup 1999 数据集，我们将利用 Spark 构造一个网络流量异常检测系统。



请切记不要基于 KDD Cup 1999 数据集建立生产系统！该数据集并不一定反映当时网络流量的真实情况，而且即便如此，它反映的网络流量规律也是 15 年前的了。

幸运的是，举办方已经对原始网络流量包进行了加工，数据转换成了每个网络连接的统计信息。数据集大小约为 708 MB，包含 490 万个连接。数据量比较大但也不算特别大，刚好满足本章论述的需要。数据集中每个连接的信息包括发送的字节数、登录次数、TCP 错误数等。数据集为 CSV 格式，每个连接占一行，包含 38 个特征，下面是其中一个连接的样例：

```
0,tcp,http,SF,215,45076,
0,0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,
0.00,0.00,0.00,0.00,1.00,0.00,0.00,0,0,0.00,
0.00,0.00,0.00,0.00,0.00,0.00,0.00,normal.
```

以上代表一个 TCP 连接，它访问 HTTP 服务，发送了数据 215 字节，收到数据 45 706 字节，用户登录成功等。其中许多特征代表统计次数，比如第 17 列的 `num_file_creations`。

许多特征取值为 0 或 1，比如第 15 列 `su_attempted`，它们代表某种行为出现与否。这些特征类似第 4 章介绍的用 one-hot 编码的类别型特征，但分类和关联方式有所不同。每个都像是一个“是 / 否”特征，因此可以认为是一个类别型特征。将类别型特征转换为数字并且按大小排序并不适合所有场景。但对于二元类别型特征这种特殊情况，将其映射为 0/1 的数值型特征对于大多数机器学习算法都是没问题的。

其他的特征都代表比率，比如 `dst_host_srv_rerror_rate`，取值的范围为 `[0.0,1.0]`。

注意最后的字段表示类别标号。大多数标号为 `normal`，但也有一些样本代表各种网络攻击。虽然这些样本可用于学习如何把“已知”的攻击从正常连接中区分开来，但这里要讨论的是异常检测问题，所以我们更关心找出新的潜在攻击，也就是“未知”攻击。因此我们先不在算法中使用这些标号信息。

5.5　初步尝试聚类

将 kddcup.data.gz 数据文件解压并复制到 HDFS 上。像以前一样，这里我们假设文件放在 /user/ds/kddcup.data 目录下。启动 `spark-shell` 并把 CSV 格式数据加载为 `String` 类型的 RDD：

```
val rawData = sc.textFile("hdfs:///user/ds/kddcup.data")
```

先来看看数据集。我们想知道数据有哪些类别标号以及每类样本有多少。以下代码分类统计样本个数，按样本数从多到少排序，然后打印结果：

```
rawData.map(_.split(',').last).countByValue().toSeq.
  sortBy(_._2).reverse.foreach(println)
```

在 Spark 中区区一行 Scala 代码就完成了如此多的任务！可以看到数据集中样本有 23 个不同类型，其中 smurf. 和 neptune. 类型的攻击最多：

```
(smurf.,2807886)
(neptune.,1072017)
(normal.,972781)
(satan.,15892)
...
```

注意数据中有些特征不是数值型的。比如第二列可能取值 tcp、udp 或 icmp，但是 *K* 均值聚类算法要求特征为数据型。最后的标号列也不是数值型。我们先简单忽略这些非数值列。以下 Spark 代码将 CSV 格式的行拆分成列，删除下标从 1 开始的三个类别型列和最后的标号列。保留其他值并将其转换成一个数值型（Double 型对象）数组，接着把数组和标号组织成一个元组：

```
import org.apache.spark.mllib.linalg._

val labelsAndData = rawData.map { line =>
  val buffer = line.split(',').toBuffer ❶
  buffer.remove(1, 3)
  val label = buffer.remove(buffer.length-1)
  val vector = Vectors.dense(buffer.map(_.toDouble).toArray)
  (label,vector)
  }

  val data = labelsAndData.values.cache()
```

❶ toBuffer 创建一个 Buffer，它是一个可变列表。

K 均值在运行过程中只用到特征向量（即没有用到数据集的目标标号列）。因此 data 这个 RDD 只包含元组的第二个元素，可以通过元组类型 RDD 的 values 属性得到。用 Spark MLlib 对数据进行聚类非常简单，只要在代码中导入 KMeans 的实现类并执行即可。下面是对数据进行聚类的代码，它先建立了 KMeansModel 模型然后输出每个簇的质心：

```
import org.apache.spark.mllib.clustering._

val kmeans = new KMeans()
val model = kmeans.run(data)

model.clusterCenters.foreach(println)
```

程序输出两个向量，代表 *K* 均值将数据聚类成 k=2 个簇。对本章的数据集，我们知道连接

的类型有 23 个，因此程序肯定没能准确刻画出数据中的不同群组。

这时利用给定的类别标号信息，我们就能直观地看到两个簇中分别包含哪些类型的样本。为此，可以对每个簇中每个标号出现的次数进行计数。利用前面得到的 K 均值模型，下面的代码先为每个数据点分配一个簇，然后对簇 – 类别对进行计数，并以可读的方式输出：

```
val clusterLabelCount = labelsAndData.map { case (label,datum) =>
  val cluster = model.predict(datum)
  (cluster,label)
}.countByValue

clusterLabelCount.toSeq.sorted.foreach {
  case ((cluster,label),count) =>
    println(f"$cluster%1s$label%18s$count%8s") ❶
}
```

❶ 使用字符插值器对变量的输出进行格式化。

结果显示聚类根本没有任何作用。簇 1 只有一个数据点！

```
0             back.    2203
0  buffer_overflow.      30
0        ftp_write.       8
0     guess_passwd.      53
0             imap.      12
0          ipsweep.   12481
0             land.      21
0       loadmodule.       9
0         multihop.       7
0          neptune. 1072017
0             nmap.    2316
0           normal.  972781
0             perl.       3
0              phf.       4
0              pod.     264
0        portsweep.   10412
0          rootkit.      10
0            satan.   15892
0            smurf. 2807886
0              spy.       2
0         teardrop.     979
0      warezclient.    1020
0      warezmaster.      20
1        portsweep.       1
```

5.6 *K*的选择

显然将数据集聚类成两个簇是不够的。但究竟聚类成多少个簇合适呢？很明显本章数据集有 23 种不同的入侵模式，因此看起来 k 至少应该取 23 或者更大。通常情况，下我们要尝试多个不同的 k 值才能找到最好的 k 值。但“最好”代表什么涵义呢？

如果每个数据点都紧靠最近的质心，则可认为聚类是较优的。因此我们定义一个欧氏距离函数和一个返回数据点到最近簇质心距离的函数，请看如下代码：

```
def distance(a: Vector, b: Vector) =
  math.sqrt(a.toArray.zip(b.toArray).
    map(p => p._1 - p._2).map(d => d * d).sum)

def distToCentroid(datum: Vector, model: KMeansModel) = {
  val cluster = model.predict(datum)
  val centroid = model.clusterCenters(cluster)
  distance(centroid, datum)
}
```

将欧氏距离的函数定义拆成几部分，然后倒过来看，这样会更好理解。该 Scala 函数定义可以一口气读成："两个向量相应元素的差的平方的和的平方根。"其中代码 `a.toArray.zip(b.toArray)` 对应"两个向量相应元素"，`map(p => p._1 - p._2)` 对应"差"，平方对应 `map(d => d * d)`，和对应 `sum`，"平方根"对应 `math.sqrt`。

定义好前面两个函数之后，就可以为一个给定 *k* 值的模型定义平均质心距离函数：

```
import org.apache.spark.rdd._

def clusteringScore(data: RDD[Vector], k: Int) = {
  val kmeans = new KMeans()
  kmeans.setK(k)
  val model = kmeans.run(data)
  data.map(datum => distToCentroid(datum, model)).mean()
}
```

现在我们可以用上述方法对 *k* 的取值进行评价，比如从 5 到 40，代码如下：

```
(5 to 40 by 5).map(k => (k, clusteringScore(data, k))).
  foreach(println)
```

Scala 通常采用 `(x to y by z)` 这种形式的惯用语法来建立一个数字集合，该集合的元素为闭合区间内的等差数列。这种语法可用于快速建立一系列 *k* 值，如"5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40"，然后对每个值分别执行某项任务。

输出结果显示得分随着 *k* 的增加而降低：

```
(5,1938.858341805931)
(10,1689.4950178959496)
(15,1381.315620528147)
(20,1318.256644582388)
(25,932.0599419255919)
(30,594.2334547238697)
(35,829.5361226176625)
(40,424.83023056838846)
```



由于聚类结果依赖于随机选择的初始质心，可能你又会看到稍微不同的结果。

但是这个结果没什么稀奇的。随着簇的增加，数据点里最近的质心肯定可以更接近。实际上如果 *k* 值等于数据点的个数，由于此时每个点都是自己构成的簇的质心，此时平均距离为 0。

更糟糕的情况是，前面的结果中 *k*=35 时的距离居然比 *k*=30 的距离大。这不应该发生，因为 *k* 取更大值时聚类的结果应该至少与 *k* 取一个较小值时的结果一样好。问题的原因在于，这种给定 *k* 值的 *K* 均值算法并不一定能得到最优聚类。*K* 均值的迭代过程是从一个随机点开始的，因此可能收敛于一个局部最小值，这个局部最小值可能还不错，但并不是全局最优的。

即使采用更加智能的方法来选择初始质心，上述情况依然会存在。"*K* 均值 ++"和"*K* 均值 ||"是 *K* 均值算法的变体，其初始质心算法更容易产生多种多样且相对分散的初始质心，因而更容易得到较好的聚类结果。实际上 Spark MLlib 实现的就是"*K* 均值 ||"算法（http://stanford.io/1ALCOaN）。但是，不管怎样这里还是有随机选择的因素，所以不能保证全局最优。

k=35 时没能取得最优聚类结果，这可能是随机初始质心所造成的，也可能是由于算法在达到局部最优之前就过早结束了。为了改善聚类结果，可以采取多次聚类的方法。通过对给定的 *k* 值进行多次聚类，每次选择不同的随机初始质心，然后从多次聚类结果中选择最优的。算法提供了 `setRuns()` 方法，我们可以通过它来设置在给定 *k* 值时运行的次数。

增加迭代时间可以优化聚类结果。算法提供了 `setEpsilon()` 来设置一个阈值，该阈值控制聚类过程中簇质心进行有效移动的最小值。降低该阈值能使质心继续移动更长的时间。

我们再次运行这个实验，但这次 *k* 取值更大，从 30 到 100。在下面示例代码中 30 到 100 这个范围用到了 Scala 的并行集合（parallel collection）。这样对每个 *k* 值的聚类计算可以在 Spark shell 中并行执行。Spark 会对所有聚类计算任务进行统一管理。当然每个 *k* 对应的并行计算都是在集群上分布式地执行的，这就是并行内部的并行。通过充分利用大规模集群的处理能力，这种做法能提高集群的总体吞吐率。当然，这里有一个临界点，同时提交的任务数超过这个临界点后吞吐率反而会下降。

```
...
kmeans.setRuns(10)
kmeans.setEpsilon(1.0e-6) ❶
...
(30 to 100 by 10).par.map(k => (k, clusteringScore(data, k))).
  toList.foreach(println)
```

❶ 默认为 1.0e–4，这里比默认值小。

这时随着 *k* 值的增大，结果得分持续下降：

```
(30,862.9165758614838)
(40,801.679800071455)
(50,379.7481910409938)
(60,358.6387344388997)
(70,265.1383809649689)
(80,232.78912076732163)
(90,230.0085251067184)
(100,142.84374573413373)
```

我们要找到 *k* 值的一个临界点，过了这个临界点之后继续增加 *k* 值并不会显著地降低得分，这个点就是 *k* 值 – 得分曲线的拐点。这条曲线通常在拐点之后会继续下行但最终趋于水平。在本示例中，在 *k* 过了 100 这个点之后得分下降还是很明显，所以 *k* 的拐点值应该大于 100。

5.7 基于R的可视化

现在我们有必要对数据进行可视化。Spark 本身没有提供可视化工具。但我们可以方便地把数据从 HDFS 上导出，然后再导入到像 R（http://www.r-project.org/）这样的统计工具中。这一节我们来简要说明基于 R 的数据集可视化。

R 可以绘制二维或三维空间中的点，但本章的数据集维度为 38。因此需要将数据集投影到不超过三维的空间上。另一方面，R 本身不适合处理大型数据集，而示例数据集对 R 来说肯定太大了。因此需要对数据集进行采样，这样 R 才能将其放入内存。

开始我们用 *k*=100 构造一个模型，并把每个数据点都映射到一个簇编号。将特征向量以 CSV 的格式写到 HDFS 上：

```
val sample = data.map(datum =>
  model.predict(datum) + "," + datum.toArray.mkString(",") ❶
).sample(false, 0.05)

sample.saveAsTextFile("/user/ds/sample")
```

❶ `mkString` 用分隔符把集合元素连接成一个字符串。

`sample()` 函数用于在所有行中选择一个较小的子集，这样数据就能稳妥地放入 R 的内存。这里选择了 5% 的行（没有进行替换）。

下列 R 代码从 HDFS 上读入 CSV 数据。当然这也可以用 rhdfs（https://github.com/RevolutionAnalytics/RHadoop/wiki）之类的工具，不过这些工具需要一些设置和安装工作。为了简单起见，这里我们使用 Hadoop 发行版的本地命令 `hdfs`。这里需要将环境变量 `HADOOP_CONF_DIR` 设置为 Hadoop 配置文件的地址，而这个配置文件定义了 HDFS 集群的地址。

使用三个随机单位向量，R 代码将 38 维数据集向这三个单位向量方向进行投影，从而得到一个三维数据集。这里我们采用的是简单粗暴的降维方法。当然我们也可以采用更加复杂的降维算法，比如主成分分析（http://en.wikipedia.org/wiki/Principal_component_analysis）算法和奇异值分解（http://en.wikipedia.org/wiki/Singular_value_decomposition）算法。这些算法在 R 里都有但运行时间很长。对于本章示例数据的可视化，采用随机投影方法效果差别不大但速度却要快很多。

可以用一个交互式的 3D 图形对结果进行展示。注意这里需要 R 运行环境支持 rgl 库和绘图工具（比如 Mac OS X 系统需要安装苹果公司的开发工具 X11）：

```
install.packages("rgl") # 这行代码只需运行一次
library(rgl)
clusters_data <-
  read.csv(pipe("hadoop fs -cat /user/ds/sample/*")) ❶
clusters <- clusters_data[1]
data <- data.matrix(clusters_data[-c(1)])
rm(clusters_data)

random_projection <- matrix(data = rnorm(3*ncol(data)), ncol = 3)
random_projection_norm <-
  random_projection /
    sqrt(rowSums(random_projection*random_projection)) ❷

projected_data <- data.frame(data %*% random_projection_norm) ❸

num_clusters <- nrow(unique(clusters))
palette <- rainbow(num_clusters)
colors = sapply(clusters, function(c) palette[c])
plot3d(projected_data, col = colors, size = 10)
```

❶ 用 hdfs 命令读取簇及数据。

❷ 创建三维空间的随机单位向量。

❸ 投影数据。

图 5-1 为可视化的结果，它显示了三维空间的数据点，不同簇用不同颜色表示。许多点都重叠在一起，而且结果很稀疏因此有些难懂。然而图形明显呈“L”状。看来数据点在两个维度上有变化而在其他维度上没什么变化。

这种现象是合理的，因为数据集有两个特征的尺度要比其他特征大得多。大多数特征的取值范围为 0 到 1，但发送字节数和接收字节数这两个特征的取值为 0 到数十字节。因此点的欧氏距离几乎完全由这两个特征决定，其他特征似乎根本就不存在。必须要对不同维度尺度进行归范化才能把特征放在差不多的基准上。

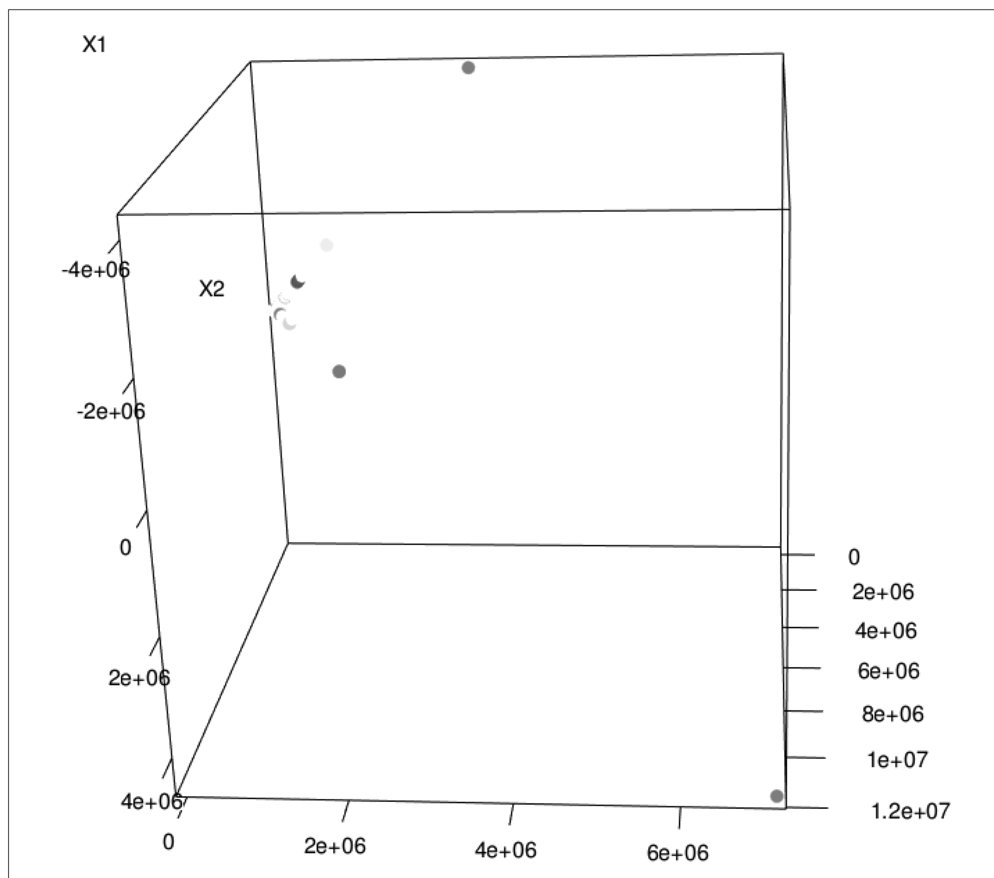


图 5-1：随机 3D 投影

5.8 特征的规范化

特征的规范化可以通过将每个特征转换为标准得分（http://en.wikipedia.org/wiki/Standard_score）来完成。这就是说用对每个特征值求平均，用每个特征值减去平均值，然后除以特征值的标准差，如下标准分计算公式所示：

$$\text{normalized}_i = \frac{\text{feature}_i - \mu_i}{\sigma_i}$$

由于减去平均值相当于把所有数据点沿相同方法移动相同距离，不影响点之间的欧氏距离，所以实际上减去平均值对聚类结果没有影响。但考虑到一致性，我们在处理规范化时还是减去了均值。

标准得分可以通过每个特征的个数、总和与平方和来计算。这里我们同时用到两个操作

`reduce` 和 `fold`，`reduce` 用于对两个数组对应元素相加，`fold` 用于把平方和汇总到一个初值为 0 的数组中：

```
val dataAsArray = data.map(_.toArray)
val numCols = dataAsArray.first().length
val n = dataAsArray.count()
val sums = dataAsArray.reduce(
  (a,b) => a.zip(b).map(t => t._1 + t._2))
val sumSquares = dataAsArray.fold(
    new Array[Double](numCols)
  )(
    (a,b) => a.zip(b).map(t => t._1 + t._2 * t._2)
  )
val stdevs = sumSquares.zip(sums).map {
  case(sumSq,sum) => math.sqrt(n*sumSq - sum*sum)/n
}
val means = sums.map(_ / n)

def normalize(datum: Vector) = {
  val normalizedArray = (datum.toArray, means, stdevs).zipped.map(
    (value, mean, stdev) =>
      if (stdev <= 0) (value - mean) else (value - mean) / stdev
  )
  Vectors.dense(normalizedArray)
}
```

增加 k 的取值范围并在规范化的数据上运行相同测试：

```
val normalizedData = data.map(normalize).cache()
(60 to 120 by 10).par.map(k =>
  (k, clusteringScore(normalizedData, k))).toList.foreach(println)
```

结果显示选取 k=100 可能比较合理：

```
(60,0.0038662664156513646)
(70,0.003284024281015404)
(80,0.00308768458568131)
(90,0.0028326001931487516)
(100,0.002550914511356702)
(110,0.002516106387216959)
(120,0.0021317966227260106)
```

对规范化数据再次在三维空间上进行可视化。如期望的那样，图形显示出更丰富的结构。有些点分布在一个方向上，间隔相差不远，这些点可能是数据中离散维度（比如个数）的投影。由于有 100 个簇群，我们很难从图形中看出每个点属于哪个簇。图中有一个占据多数的大簇群和有许多小簇群，小簇群显示为紧凑的子区域（图 5-2 是整个三维图形中的一部分，并经过了放大处理，所以图中有些簇没有显示出来）。图 5-2 的结果虽然没有进一步提升我们的分析结果，但它进行的完整性检查是有帮助的。

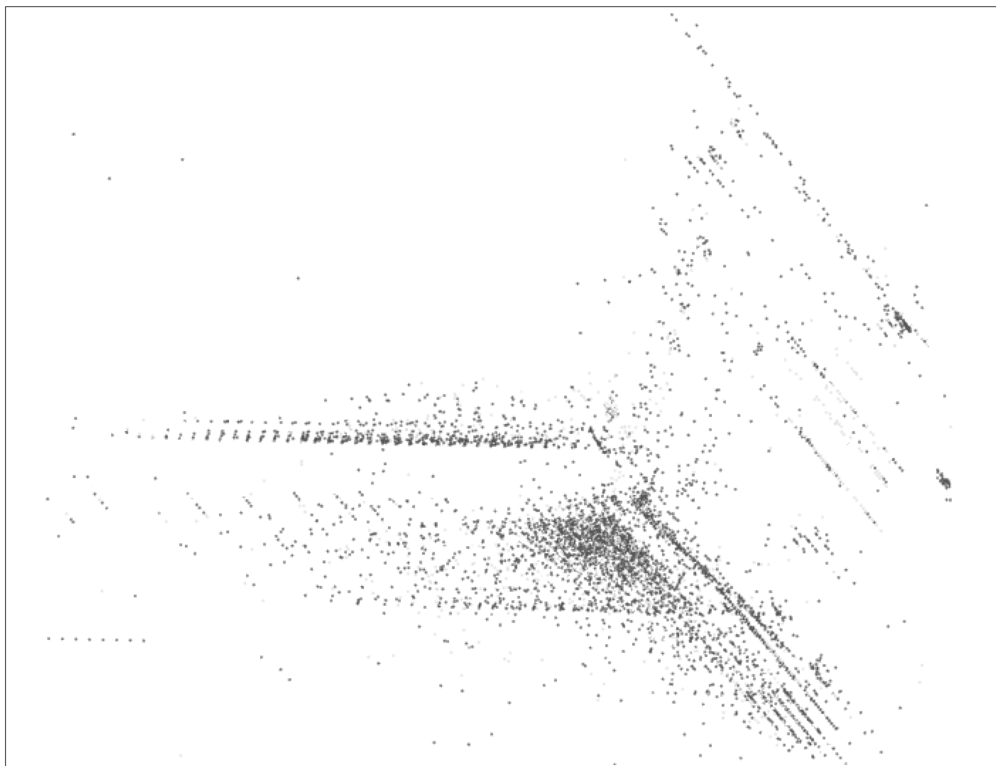


图 5-2：规范化数据的随机三维投影

5.9 类别型变量

在本章的前面几节中，因为 MLlib 的 *K* 均值实现的欧氏距离函数中不能使用非数值型特征，所以我们把三个类别型特征排除掉了。这种对类别型特征的处理方法与第 4 章的不同，第 4 章将原本为类别型的特征处理成了数值型特征。

类别型特征可以用 one-hot 编码转换为几个二元特征，这几个二元特征可以看成数值型维度。举个例子，数据集的第二列代表协议类型，取值可能是 `tcp`、`udp` 或 `icmp`。可以把它们看成三个特征，分别取名为 `is_tcp`、`is_udp` 和 `is_icmp`。这样，特征值 `tcp` 就变成 `1,0,0`，`udp` 对应 `0,1,0`，`icmp` 对应 `0,0,1`。基于 one-hot 编码实现类别型变量替换逻辑，请参考本书在 GitHub 上的代码库，这里不再赘述。

数据集经过编码后所占空间有所增加，这时我们重新对其进行规范化和聚类。运行时，还可能需要将 *k* 值设得更大。由于单个聚类任务变大了，所以还是去掉代码中的 `.par` 比较好，这样每次就只计算一个模型：

```
(80,0.038867919526032156)
(90,0.03633130732772693)
(100,0.025534431488492226)
(110,0.02349979741110366)
(120,0.01579211360618129)
(130,0.011155491535441237)
(140,0.010273258258627196)
(150,0.008779632525837223)
(160,0.009000858639068911)
```

即使重复运行 10 次，*k* 取 160 的聚类结果也没有取 150 的好。上述示例结果表明 *k* 应该取 150，当然你看到的得分结果还是可能略有不同。

5.10 利用标号的熵信息

前面在对聚类质量作快速的完整性检查时，我们使用了数据点的类别标号信息。这个概念可以进一步规范化，将其作为评价聚类质量的一种可能方法，这样我们就可以用它选择 *k* 值。

如果一个聚类结果好，那么结果簇应包含一个或多个已知的攻击类型样本，而不应该包含其他类型，这种推断是合理的。回顾第 4 章，我们定义了同质性指标：Gini 不纯度和熵。本节使用熵作为同质性度量。

良好的聚类结果簇中样本类别大体相同，因而熵值较低。我们可以对各个簇的熵加权平均，将结果作为聚类得分：

```
def entropy(counts: Iterable[Int]) = {
  val values = counts.filter(_ > 0)
  val n: Double = values.sum
  values.map { v =>
    val p = v / n
    -p * math.log(p)
  }.sum
}

def clusteringScore(
    normalizedLabelsAndData: RDD[(String,Vector)],
     k: Int) = {
  ...

  val model = kmeans.run(normalizedLabelsAndData.values)

  val labelsAndClusters =
    normalizedLabelsAndData.mapValues(model.predict) ❶

  val clustersAndLabels = labelsAndClusters.map(_.swap) ❷

  val labelsInCluster = clustersAndLabels.groupByKey().values ❸
```

```
  val labelCounts = labelsInCluster.map(
    _.groupBy(l => l).map(_._2.size)) ❹

  val n = normalizedLabelsAndData.count()

  labelCounts.map(m => m.sum * entropy(m)).sum / n ❺
}
```

❶ 对每个数据预测簇类别。

❷ 对换键和值。

❸ 按簇提取标号集合。

❹ 计算集合中各簇标号出现的次数。

❺ 根据簇大小计算熵的加权平均。

跟以前一样，可以根据上面的分析结果大致看出 *k* 的合适取值。随着 *k* 的增加，熵不一定会减小，因此我们找到的可能是一个局部最小值。这里结果同样表明 *k* 取 150 可能比较合理：

```
(80,1.0079370754411006)
(90,0.9637681417493124)
(100,0.9403615199645968)
(110,0.4731764778562114)
(120,0.37056636906883805)
(130,0.36584249542565717)
(140,0.10532529463749402)
(150,0.10380319762303959)
(160,0.14469129892579444)
```

5.11 聚类实战

现在我们对聚类模型质量比较有信心了。最后我们来对规范化后的全体数据进行聚类，并取 *k*=150。为了大致了解聚类结果，这里我们同样把每个簇的标号打印出来。聚类的结果中大部分样本确实属于同一簇：

```
0           back.       6
0        neptune.  821239
0         normal.     255
0      portsweep.     114
0          satan.      31
...
90      ftp_write.       1
90     loadmodule.       1
90        neptune.       1
90         normal.   41253
90    warezclient.      12
...
93         normal.       8
93      portsweep.    7365
93    warezclient.       1
```

现在可以建立一个真正的异常检测系统了。异常检测时需要度量新数据点到最近的簇质心的距离。如果这个距离超过某个阈值，那么就表示这个新数据点是异常的。我们可以把阈值设为已知数据中离中心最远的第 100 个点到中心的距离。

```
val distances = normalizedData.map(
  datum => distToCentroid(datum, model)
)
val threshold = distances.top(100).last
```

最后一步就是在新数据点出现的时候使用阈值进行评估。举个例子，可以用 Spark Streaming 对来源于 Flume、Kafka 或 HDFS 文件的小批量数据计算函数值。只要计算结果超过阈值就触发邮件报警或更新数据库。

作为示例，我们在原始数据集上进行异常检查。这样就能找出输入数据中我们认为最不寻常的异常数据。为了便于说明，我们把原始数据和解析后的特征向量放在一起：

```
val model = ...
val originalAndData = ...
val anomalies = originalAndData.filter { case (original, datum) =>
  val normalized = normalizeFunction(datum)
  distToCentroid(normalized, model) > threshold
}.keys
```

为了满足大家的好奇心，下面列出了根据模型计算出的最不寻常的异常点：

```
0,tcp,http,S1,299,26280,
0,0,0,1,0,1,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,15,16,
0.07,0.06,0.00,0.00,1.00,0.00,0.12,231,255,1.00,
0.00,0.00,0.01,0.01,0.01,0.00,0.00,normal.
```

网络安全专家估计很快就能看出为什么这是一个异常连接或者其实不是一个异常连接。这个数据点被标记为 `normal`，但却在很短的时间内与同一个服务建立了超过 200 个连接，并且 TCP 状态为不正常的 `S1`。从这些现象看，这个数据点也算得上不同寻常。

5.12　小结

本质上，`KMeansModel` 模型本身就是一个异常检测系统。前面我们在代码中演示了如何用它来检测数据中的异常。这些代码同样可以用于 Spark Streaming（https://spark.apache.org/streaming/）中，在数据出现时以准实时的方式对数据评分，如果有异常就触发报警或审查。

MLlib 还有 `KMeansModel` 的一个变体，被称为 `StreamingKMeans`。`StreamingKMeans` 模型能够根据增量对簇进行更新。有了 `StreamingKMeans`，我们就不再只是用已知簇群评价新数据，而是进一步做到近似地学习新数据如何影响聚类过程了。这也可以集成到 Spark Streaming 上。

这个聚类模型只是一个简单的实现。比如由于 Spark MLlib 目前只提供了欧氏距离一种实现，所以本章示例中我们采用的是欧氏距离。Spark MLlib 今后版本可能会提供其他距离函数，比如马氏距离（http://en.wikipedia.org/wiki/Mahalanobis_distance），这样就可能会更好地描述特征的关联关系。

我们还可以用更复杂的聚类质量评估指标（http://en.wikipedia.org/wiki/Cluster_analysis#Internal_evaluation），比如轮廓系数（Silhouette coefficient，http://en.wikipedia.org/wiki/Silhouette_(clustering)），甚至可以在不给定标号的条件下用这些指标来选择合适的 k 值。这些指标既可以评价簇内点的紧密程度又可以评价点与其他簇之间的紧密程度。

最后，除了 K 均值聚类外，我们还可以尝试其他模型。比如，高斯混合模型（http://en.wikipedia.org/wiki/Mixture_model#Gaussian_mixture_model）或 DBSCAN（http://en.wikipedia.org/wiki/DBSCAN）可用于处理数据点和簇中心之间更加微妙的关系。

Spark MLlib 的后续版本或其他基于它的库可能会提供这些模型的实现。

当然，聚类的应用不只是局限在异常检查。事实上聚类往往与使用场景相关。在这些场景中，实际的簇很重要。比如，可以根据用户的行为、偏好和属性来聚类。每个簇本身就可能代表一类顾客，将这类顾客区分出来是很有意义的。相比学习“年龄在 20 到 34 岁”和“女性”之类的普通群组划分，这种客户划分方法的数据驱动程度更高。

第6章

基于潜在语义分析算法分析维基百科

作者：Sandy Ryza

去年的斯诺登夫妇如今在何方？
——Capt. Yossarian

数据工程的大多数任务都是把数据“组装”为某种可查询的格式。我们可以用形式化语言对结构化的数据进行查询。例如，用 SQL 来查询结构化的表数据。虽然访问表数据实际上也非易事，但从表面上看，准备这种数据还是很直观的：只不过是从多个数据源读取数据并写入一张表，然后可能再进行数据清洗或智能数据融合。相比之下，处理非结构化的文本数据则要困难得多。要将文本数据处理成人类可以理解的格式可不是“组装”这么简单。即使情况简单，也需要给它建立索引；如果情况复杂，甚至还得做某种“强制性”的工作。给包含某个特定词汇的文档创建标准索引可以加快查询的速度。但有时候我们希望找出文档中是否有包含某个特定词汇的相关概念，而不是仅仅匹配这个特定词汇的字符串。标准索引常常无法发掘文本主题的潜在结构。

潜在语义分析（LSA，Latent Semantic Analysis）是一种自然语言处理和信息检索技术，其目的是更好地理解文档语料库以及文档中词项的关系。它将语料库提炼成一组相关概念，每个概念捕捉了数据中一个不同的主题，且通常与语料库讨论的主题相符合。为了不涉及过多数学细节，我们可以把每个概念看成由三个属性组成：语料库中文档的相关度、语料库中词项的相关度，以及概念对描述主题的重要性评分。举个例子，LSA 可能发现一个概念与“Asimov”和“robot”高度相关，与文档“Foundation series”和“Science Fiction”也高度相关。通过挑选出最重要的概念，LSA 可以过滤掉不相关的噪声并合并同时出现的

主题，从而简化数据。

这种化简技术应用得非常广泛。它可以计算词项与词项、文档与文档、词项与文档之间的相似度评分。通过发掘语料库中的不同主题模式，LSA 算法在计算相似度评分时不再简单地基于词项出现的频率和两个词项同时出现的频率，而是基于更深入的分析。这些相似度度量方法适合根据词项查询相关文档、按主题将文档分组和找到相关的词项等任务。

LSA 在降维过程中使用一种称为*奇异值分解*（SVD，Singular Value Decomposition）的线性代数技术。我们可以把 SVD 看成第 3 章讨论的 ALS 分解的升级版。首先，需要根据词项在每个文档中的出现次数构造一个词项 – 文档矩阵。矩阵中每个文档对应一列，每个词项对应一行，矩阵的每个元素代表某个词项在对应文档中的重要性。接着，SVD 将矩阵分解成三个矩阵，其中一个矩阵代表文档中出现的概念，另一个代表词项对应的概念，还有一个代表每个概念的重要度。这三个矩阵的结构可以让我们通过去掉最不重要的概念所对应的行和列而获得原始矩阵的一个*低阶近似*。也就是说，将这些低阶近似矩阵相乘可以得到原始矩阵的近似，去掉的概念越多，就越失真。

本章将基于人类知识库的潜在语义关系讨论如何构建人类知识库的查询模型。具体来说，我们将在维基百科所有文档组成的语料库上运行 LSA 算法，文本格式的语料库大小约为 46 GB。我们会讨论如何使用 Spark 进行数据预处理，包括数据读取、清洗并转换成数值。我们会演示如何计算 SVD，并解释怎样理解和利用 SVD 算法。

除了 LSA 之外，SVD 还存在其他很多用途，比如识别气候趋势（如著名的 Michael Mann 曲棍球杆曲线：http://en.wikipedia.org/wiki/Hockey_stick_controversy）、人脸识别和图像压缩等。Spark 的实现可以在大量数据集上执行矩阵因子分解，这就将该新技术推向了全新的应用领域。

6.1 词项–文档矩阵

在进行分析之前，LSA 算法需要将语料库中的文本转换成词项 – 文档矩阵。该矩阵的每行代表语料库中出现的一个词项，每列代表一篇文档。不严格地讲，矩阵中每个元素值代表了相应行上的词项相对于相应列上的文档的权重。人们提出了几种方法来表示这种权重，其中用得最多的是用词项频率除以文档频率，该方法通常简写为 TF-IDF（term frequency times inverse document frequency），其函数定义代码如下：

```
def termDocWeight(termFrequencyInDoc: Int, totalTermsInDoc: Int,
    termFreqInCorpus: Int, totalDocs: Int): Double = {
  val tf = termFrequencyInDoc.toDouble / totalTermsInDoc
  val docFreq = totalDocs.toDouble / termFreqInCorpus
  val idf = math.log(docFreq)
  tf * idf
}
```

TF-IDF 体现了我们对词项与文档关联度的两个直观理解。第一，一个词项在文档中出现的次数越多，它相对于文档的重要性越高。第二，总体上讲词项是不平等的。文档中出现语料库中罕见词项的意义比出现常见词项更大，因此指标就是词项在所有语料库中出现次数的倒数。

词项在语料库中的频率分布往往呈指数型。一个常用词出现的次数往往是一个次常用词出现次数的十几倍，是一个罕见词出现次数的一百多倍。如果计算指标时直接除以原始文档频率，罕见词的权重就会过大，这时相比之下其他非罕见词的权重几乎可以忽略不计了。为了刻画这种指数分布，算法对逆文档频率取对数。这样文档频率的差别就从乘数级变成了加数级。

这个模型依赖几个假设。它把每个文档看成词项的集合，也就是说算法没有考虑词项的顺序、句式结构或否定情况。由于只针对每个词项，模型很难处理多义词。举个例子，"Radiohead is the best band ever"和"I broke a rubber band"这两句话中的词项"band"含义不同，模型对此就不能区分。如果两个句子在语料库中出现的次数相同，模型可能就会把 Radiohead 和 rubber 关联在一起。

本章所用的语料库有一千万个文档。如果把那些晦涩的技术术语包含在内，英语语言总共约有一百万个词项。本章的语料库只包含其中的大约几万个。因为语料库的文档数远远大于词项数，所以我们的词项 – 文档矩阵应该是行矩阵，由许多稀疏向量组成，每个向量代表一个文档。

将原始的维基百科导出文件转成词项 – 文档矩阵需要进行许多预处理。首先，输入是一个巨大的 XML 文件，其中每个文档由 `<page>` 标签分隔。我们需要先对输入进行拆分，然后才能将维基百科格式转换成纯文本格式。接着纯文本被拆成词条（token）。将词条的不同曲折词缀还原为词根的过程称为*词形归并*（lemmatization）。经过词形归并之后得到的词条可以用于计算词项频率和文档频率。最后我们将这些频率组织成需要的向量对象。

预处理的前几步都可以根据文档进行完全并行化（对应 Spark 中的一组 `map` 函数），但计算逆文档频率时需要对所有文档进行汇总。可以利用许多通用的 NLP 工具和维基百科特有的提取工具来完成这些步骤。

6.2 获取数据

我们可以从维基百科上导出所有文章，导出的文件是一个巨大的 XML 文件。我们先从 http://dumps.wikimedia.org/enwiki 下载这个 XML 文件，然后将这个文件写入 HDFS 上，示例代码如下：

```
$ curl -s -L http://dumps.wikimedia.org/enwiki/latest/\
$ enwiki-latest-pages-articles-multistream.xml.bz2 \
```

```
$   | bzip2 -cd \
$   | hadoop fs -put - /user/ds/wikidump.xml
```

这个过程要花一段时间。

6.3 分析和准备数据

下面是导出文件的开头部分：

```
    <page>
      <title>Anarchism</title>
      <ns>0</ns>
      <id>12</id>
      <revision>
        <id>584215651</id>
        <parentid>584213644</parentid>
        <timestamp>2013-12-02T15:14:01Z</timestamp>
        <contributor>
          <username>AnomieBOT</username>
          <id>7611264</id>
        </contributor>
        <comment>Rescuing orphaned refs (&quot;autogenerated1&quot; from rev
        584155010; &quot;bbc&quot; from rev 584155010)</comment>
        <text xml:space="preserve">{{Redirect|Anarchist|the fictional character|
        Anarchist (comics)}}
{{Redirect|Anarchists}}
{{pp-move-indef}}
{{Anarchism sidebar}}

'''Anarchism''' is a [[political philosophy]] that advocates [[stateless society|
stateless societies]] often defined as [[self-governance|self-governed]] voluntary
institutions,&lt;ref&gt;&quot;ANARCHISM, a social philosophy that rejects
authoritarian government and maintains that voluntary institutions are best suited
to express man's natural social tendencies.&quot; George Woodcock.
&quot;Anarchism&quot; at The Encyclopedia of Philosophy&lt;/ref&gt;&lt;ref&gt;
&quot;In a society developed on these lines, the voluntary associations which
already now begin to cover all the fields of human activity would take a still
greater extension so as to substitute
...
```

现在打开 Spark shell。为了简化工作，我们使用几个工具包。GitHub 上有一个 Maven 项目，我们可以用它来生成一个 JAR 文件，这个 JAR 文件包含所有这些依赖包：

```
$ cd lsa/
$ mvn package
$ spark-shell --jars target/ch06-lsa-1.0.0.jar
```

我们根据 Apache Mahout 项目编写了一个 `XmlInputFormat` 类，这个类可以把巨大的维基百科导出文件拆成文档。现在我们用这个类来创建一个 RDD：

```
import com.cloudera.datascience.common.XmlInputFormat
import org.apache.hadoop.conf.Configuration
import org.apache.hadoop.io._

val path = "hdfs:///user/ds/wikidump.xml"
@transient val conf = new Configuration()
conf.set(XmlInputFormat.START_TAG_KEY, "<page>")
conf.set(XmlInputFormat.END_TAG_KEY, "</page>")
val kvs = sc.newAPIHadoopFile(path, classOf[XmlInputFormat],
  classOf[LongWritable], classOf[Text], conf)
val rawXmls = kvs.map(p => p._2.toString)
```

要讲述如何将维基百科的 XML 文件转成纯文本估计要整整一章。幸运的是，我们可以利用 Cloud9 项目提供的 API 来完成所有工作：

```
import edu.umd.cloud9.collection.wikipedia.language._
import edu.umd.cloud9.collection.wikipedia._

def wikiXmlToPlainText(xml: String): Option[(String, String)] = {
  val page = new EnglishWikipediaPage()
  WikipediaPage.readPage(page, xml)
  if (page.isEmpty) None
  else Some((page.getTitle, page.getContent))
}

val plainText = rawXmls.flatMap(wikiXmlToPlainText)
```

6.4　词形归并

现在我们得到了纯文本形式的语料库，接下来要提炼出一组词项。这一步有几点需要特别注意。第一，像 the 和 is 之类的常用词不会为模型提供有用信息，却占用了大量空间。去掉这些*停用词*（stop word）不但能节省空间，还能提高忠实度。第二，相同意思的词项可能有不同词形。比如，monkey 和 monkeys 不应该算成不同词项，再比如 nationalize 和 nationalization。把这些不同曲折词缀合并成单个词项的过程成为词干还原（stemming）或词形归并（lemmatization）。词干还原指去除单词两端词缀的启发式技术，词形归并方法则更加规则化。比如前者可能将 drew 截断为 dr，而后者则更可能给出 draw 这个正确结果。Stanford Core NLP 项目是一个非常优秀的词干规约工具，它提供了 Java API，我们可以在 Scala 中调用。下面的代码接收纯文本形式的文档 RDD，对文档进行词形归并，过滤掉其中的停用词：

```
import edu.stanford.nlp.pipeline._
import edu.stanford.nlp.ling.CoreAnnotations._

def createNLPPipeline(): StanfordCoreNLP = {
  val props = new Properties()
  props.put("annotators", "tokenize, ssplit, pos, lemma")
  new StanfordCoreNLP(props)
```

```
}

def isOnlyLetters(str: String): Boolean = {
  str.forall(c => Character.isLetter(c))
}

def plainTextToLemmas(text: String, stopWords: Set[String],
    pipeline: StanfordCoreNLP): Seq[String] = {
  val doc = new Annotation(text)
  pipeline.annotate(doc)

  val lemmas = new ArrayBuffer[String]()
  val sentences = doc.get(classOf[SentencesAnnotation])
  for (sentence <- sentences;
      token <- sentence.get(classOf[TokensAnnotation])) {
    val lemma = token.get(classOf[LemmaAnnotation])
    if (lemma.length > 2 && !stopWords.contains(lemma)
        && isOnlyLetters(lemma)) { ❶
      lemmas += lemma.toLowerCase
    }
  }
  lemmas
}

val stopWords = sc.broadcast(
  scala.io.Source.fromFile("stopwords.txt).getLines().toSet).value
val lemmatized: RDD[Seq[String]] = plainText.mapPartitions(it => {
  val pipeline = createNLPPipeline()
  it.map { case(title, contents) =>
    plainTextToLemmas(contents, stopWords, pipeline)
  }
}) ❷
```

❶ 为防止垃圾词元，需对词元设定最低要求。

❷ 这里使用了 `mapPartitions` 对每个分区只初始化一个 NLP 管道对象，而不是为每一个文档初始化一个 NLP 管道对象。

6.5 计算TF-IDF

现在 `lemmatized` 指向一个词项数组 RDD，每个数组对应一个文档。下一步我们要计算每个词项在每个文档和整个语料库中的频率。下面的代码构建了词项到每个文档的词项频率的映射：

```
import scala.collection.mutable.HashMap

val docTermFreqs = lemmatized.map(terms => {
  val termFreqs = terms.foldLeft(new HashMap[String, Int]()) {
    (map, term) => {
      map += term -> (map.getOrElse(term, 0) + 1)
      map
```

```
    }
  }
  termFreqs
})
```

后面至少两次要用到结果 RDD：一次用于计算逆文档频率，另一次用于计算最终的词项 – 文档矩阵。因此我们需要将它缓存起来：

```
docTermFreqs.cache()
```

现在来看看计算文档频率（也就是对每个词项计算它在整个语料库中的多少个文档中出现过）的几种方法。第一种使用 aggregate 行动为每个分区构建一个词项到频率的本地 map，然后在驱动程序中将所有 map 合并。aggregate 接受两个函数，一个用于把记录合并到各个分区的结果对象中，另一个用于把两个结果对象合并在一起。在本章示例中，每个记录是词项到文档中该词项频率的映射，结果对象为词项到文档集合中该词项的总词项频率。如果汇总的记录类型和结果对象类型相同（比如求和），可以用 reduce 函数。但如果记录类型和结果类型不同，就要使用更强大的 aggregate 函数，我们这里就是后面这种情况：

```
val zero = new HashMap[String, Int]()
def merge(dfs: HashMap[String, Int], tfs: HashMap[String, Int])
  : HashMap[String, Int] = {
  tfs.keySet.foreach { term =>
    dfs += term -> (dfs.getOrElse(term, 0) + 1)
  }
  dfs
}
def comb(dfs1: HashMap[String, Int], dfs2: HashMap[String, Int])
  : HashMap[String, Int] = {
  for ((term, count) <- dfs2) {
    dfs1 += term -> (dfs1.getOrElse(term, 0) + count)
  }
  dfs1
}
docTermFreqs.aggregate(zero)(merge, comb)
```

在整个语料库上执行上述代码会得到如下结果：

```
java.lang.OutOfMemoryError: Java heap space
```

这是什么情况？看起来好像文档中的整个词项集合无法放入驱动程序端的内存。到底有多少个词项？

```
docTermFreqs.flatMap(_.keySet).distinct().count()
...
res0: Long = 9014592
```

结果词项中有许多是垃圾词项，它们在语料库中只出现过一次。去掉这些低频词项不但可以加快速度而且能过滤掉噪声。一种合理的做法就是只保留频率最高的 N 个词项（这里 N

的取值约为几万）。下面的代码用分布式的方式计算文档频率。代码和我们演示一个简单的 MapReduce 程序所用的经典词项计数程序差不多。文档每出现一个不同的词项，程序就生成一个由词项和数字 1 组成的键 – 值对，`reduceByKey` 操作将每个词项在整个数据集上的值进行汇总。

```
val docFreqs = docTermFreqs.flatMap(_.keySet).map((_, 1)).
  reduceByKey(_ + _)
```

`top` 行动返回最大的 *N* 条记录给驱动程序。为了适应词项 – 次数这种结构，这里我们用了一个定制的 `Ordering`：

```
val numTerms = 50000
val ordering = Ordering.by[(String, Int), Int](_._2)
val topDocFreqs = docFreqs.top(numTerms)(ordering)
```

有了文档频率，就可以计算逆文档频率了。这里计算逆文档频率是在驱动程序中，并不是用执行器分布式执行的。这样可以在每次引用词项时避免重复的浮点数数学运算。

```
val idfs = docFreqs.map{
  case (term, count) => (term, math.log(numDocs.toDouble / count))
}.toMap
```

现在我们有了计算 TF-IDF 向量所需的词项频率和逆文档频率。但还有最后一个问题：当前 `map` 中数据的键是字符串类型的，而 MLlib 要求将它们转换成整数型。为此需要为每个词项分配一个唯一 ID：

```
val termIds = idfs.keys.zipWithIndex.toMap
```

由于词项 ID `map` 不是特别大，并且我们在好几个地方都要用到它，所以将其设为广播变量：

```
val bTermIds = sc.broadcast(termIds).value
```

最后为每个文档建立一个含权重的 TF-IDF 向量。由于每个文档只包含所有词项的一小部分，所以这里我们使用稀疏向量。可以通过指定向量大小和一系列下标 – 值的二元对来构造一个 MLlib 稀疏向量，代码如下：

```
import scala.collection.JavaConversions._
import org.apache.spark.mllib.linalg.Vectors

val vecs = docTermFreqs.map(termFreqs => {
  val docTotalTerms = termFreqs.values().sum
  val termScores = termFreqs.filter {
    case (term, freq) => bTermIds.containsKey(term)
  }.map{
    case (term, freq) => (bTermIds(term),
      bIdfs(term) * termFreqs(term) / docTotalTerms)
```

```
    }.toSeq
    Vectors.sparse(bTermIds.size, termScores)
  })
```

6.6 奇异值分解

现在有了词项 – 文档矩阵 M，我们的分析工作就可以进入矩阵分解和降维的步骤了。MLlib 提供了一个奇异值分解算法（SVD，Singular Value Decomposition）的实现，能处理巨型矩阵。奇异值分解算法接受一个 $m \times n$ 维矩阵，返回三个矩阵。这三个矩阵的乘积近似等于原始的 $m \times n$ 维矩阵：

$$M \approx USV^T$$

- U 为 $m \times k$ 维矩阵，U 中的列是文档空间的正交基。
- S 为 $k \times k$ 型对角阵，每个对角元素代表一个概念的强度。
- V 为 $k \times n$ 型矩阵，V 中的列是词项空间的正交基。

对于 LSA 模型，m 是文档的个数，n 是词项的个数。分解过程有一个参数 k，其值不大于 n，代表要保留的概念的个数。当 $k=n$ 时，分解矩阵的乘积精确重构出原始矩阵。$k<n$ 时，分解矩阵的乘积是原始矩阵的一个低阶近似。一般 k 的取值要远小于 n。SVD 算法保证在最多只采用 k 个概念的约束下，算法结果是对原始矩阵的最优逼近（由 L2 范式定义，也就是误差平方和最小）。

要得到矩阵的奇异值分解，只要将行向量 RDD 包装为 `RowMatrix` 并调用 `computeSVD` 即可，代码如下：

```
import org.apache.spark.mllib.linalg.distributed.RowMatrix

termDocMatrix.cache()
val mat = new RowMatrix(termDocMatrix)
val k = 1000
val svd = mat.computeSVD(k, computeU=true)
```

由于计算过程需要多次使用 RDD 数据，所以我们应该事先将 RDD 缓存起来。驱动程序端运算的空间复杂度为 $O(nk)$，每个任务的空间复杂度为 $O(n)$，需要使用数据的次数为 $O(k)$。

注意，*词项空间*中的每个向量都有一个词项权重，*文档空间*中的每个向量都有一个文档权重，*概念空间*中的每个向量都有一个概念权重。每个词项、文档或概念都在各自空间中定义了一个轴，词项、文档和概念的权重就是在轴方向上的长度。每个词项或文档向量都可以映射为概念空间里的相应向量。每个概念向量可能对应多个词向量和文档向量，其中包括一个规范化词向量和文档向量，对概念向量进行逆向转换就得到规范化的词向量和文档向量。

V 是 $n \times k$ 型矩阵，每一行对应一个词项，每一列对应一个概念。这个矩阵定义了词项空间到概念空间的映射。其中，词项空间中每个点是一个 n 维向量，向量的每个元素是每个词项的权重；概念空间中每个点是一个 k 维向量，向量的每个元素是概念的权重。

类似地，U 是 $m \times k$ 型矩阵，U 中每一行对应一个文档，每一列对应一个概念。U 定义了一个文档空间到概念空间的映射。

S 是一个 $k \times k$ 的对角阵，其中保存了奇异值。S 中每个对角线上的元素对应了一个概念（因此对应了 V 和 U 中的一列）。奇异值的大小对应了概念的重要程度亦即概念在解释不同主题时的能力。SVD 的一种可能但效率不高的实现是先得到 k 阶分解，具体做法是先进行 n 阶分解，不停地去掉 $n-k$ 个最小奇异值，直到只剩下 k 个奇异值（当然还有 U 和 V 中对应的列）。LSA 算法的一个要点是概念中只有一小部分对表示数据是重要的。S 矩阵中的元素直接表示每个概念的重要性，它们正好是 MM^T 的特征值的平方根。

6.7 找出重要的概念

SVD 算法的输出是一组数值。我们该如何验证这些数值实际有没有作用呢？ V 矩阵表示了词项对概念的重要程度。如前所述，一个概念都对应 V 中一列，每个词项都对应 V 中一行。每个元素可以理解为词项相对于概念的相关度。因此我们可以用如下代码得到与那些最重要的概念最相关的词项：

```
import scala.collection.mutable.ArrayBuffer

val v = svd.V
val topTerms = new ArrayBuffer[Seq[(String, Double)]]()
val arr = v.toArray
for (i <- 0 until numConcepts) {
  val offs = i * v.numRows
  val termWeights = arr.slice(offs, offs + v.numRows).zipWithIndex
  val sorted = termWeights.sortBy(-_._1)
  topTerms += sorted.take(numTerms).map{
    case (score, id) => (termIds(id), score)
  }
}
topTerms
```

注意 V 是驱动程序进程内存里的一个本地矩阵，以非分布式的计算方式得到。类似地，我们可以通过 U 得到和重要概念相关的词项，但由于 U 是一个分布式矩阵，所以代码稍有不同。

```
def topDocsInTopConcepts(
    svd: SingularValueDecomposition[RowMatrix, Matrix],
    numConcepts: Int, numDocs: Int, docIds: Map[Long, String])
  : Seq[Seq[(String, Double)]] = {
  val u = svd.U
```

```
  val topDocs = new ArrayBuffer[Seq[(String, Double)]]()
  for (i <- 0 until numConcepts) {
    val docWeights = u.rows.map(_.toArray(i)).zipWithUniqueId()
    topDocs += docWeights.top(numDocs).map{
      case (score, id) => (docIds(id), score) ❶
    }
  }
  topDocs
}
```

❶ 为了讨论的连贯性，我们省略了建立 doc ID 映射的过程。这个过程并不复杂，详细代码请参考本书对应的 GitHub 资料库。

现在我们来看看前面的一些概念：

```
val topConceptTerms = topTermsInTopConcepts(svd, 4, 10, termIds)
val topConceptDocs = topDocsInTopConcepts(svd, 4, 10, docIds)
for ((terms, docs) <- topConceptTerms.zip(topConceptDocs)) {
  println("Concept terms: " + terms.map(_._1).mkString(", "))
  println("Concept docs: " + docs.map(_._1).mkString(", "))
  println()
}

Concept terms: summary, licensing, fur, logo, album, cover, rationale,
  gif, use, fair
Concept docs: File:Gladys-in-grammarland-cover-1897.png,
  File:Gladys-in-grammarland-cover-2010.png, File:1942ukrpoljudeakt4.jpg,
  File:Σακελλαρίδης.jpg, File:Baghdad-texas.jpg, File:Realistic.jpeg,
  File:DuplicateBoy.jpg, File:Garbo-the-spy.jpg, File:Joysagar.jpg,
  File:RizalHighSchoollogo.jpg

Concept terms: disambiguation, william, james, john, iran, australis,
  township, charles, robert, river
Concept docs: G. australis (disambiguation), F. australis (disambiguation),
  U. australis (disambiguation), L. maritima (disambiguation),
  G. maritima (disambiguation), F. japonica (disambiguation),
  P. japonica (disambiguation), Velo (disambiguation),
  Silencio (disambiguation), TVT (disambiguation)

Concept terms: licensing, disambiguation, australis, maritima, rawal,
  upington, tallulah, chf, satyanarayana, valérie
Concept docs: File:Rethymno.jpg, File:Ladycarolinelamb.jpg,
  File:KeyAirlines.jpg, File:NavyCivValor.gif, File:Vitushka.gif,
  File:DavidViscott.jpg, File:Bigbrother13cast.jpg, File:Rawal Lake1.JPG,
  File:Upington location.jpg, File:CHF SG Viewofaltar01.JPG

Concept terms: licensing, summarysource, summaryauthor, wikipedia,
  summarypicture, summaryfrom, summaryself, rawal, chf, upington
Concept docs: File:Rethymno.jpg, File:Wristlock4.jpg, File:Meseanlol.jpg,
  File:Sarles.gif, File:SuzlonWinMills.JPG, File:Rawal Lake1.JPG,
  File:CHF SG Viewofaltar01.JPG, File:Upington location.jpg,
  File:Driftwood-cover.jpg, File:Tallulah gorge2.jpg
```

```
Concept terms: establishment, norway, country, england, spain, florida,
  chile, colorado, australia, russia
Concept docs: Category:1794 establishments in Norway,

  Category:1838 establishments in Norway,
  Category:1849 establishments in Norway,
  Category:1908 establishments in Norway,
  Category:1966 establishments in Norway,
  Category:1926 establishments in Norway,
  Category:1957 establishments in Norway,
  Template:EstcatCountry1stMillennium,
  Category:2012 establishments in Chile,
  Category:1893 establishments in Chile
```

第一个概念对应的文档看起来都是关于图片的，词项看起来都和图片属性和授权相关。第二个概念看起来是一个答疑页面。这说明维基百科导出文件除了包含维基百科上的原始文章，很可能还包含一些管理页面和讨论页面。通过检查中间阶段的输出，我们可以尽早发现这类问题。幸运的是 Cloud9 项目提供了过滤这些页面的功能。修改后的 `wikiXmlToPlainText` 方法代码如下：

```
def wikiXmlToPlainText(xml: String): Option[(String, String)] = {
  ...
  if (page.isEmpty || !page.isArticle || page.isRedirect ||
    page.getTitle.contains("(disambiguation)")) {
  } else{
    Some((page.getTitle, page.getContent))
  }
}
```

在过滤后的文档集上重新运行处理过程，就会得到如下结果，它看起来比上一次的结果更加合理：

```
Concept terms: disambiguation, highway, school, airport, high, refer,
  number, squadron, list, may, division, regiment, wisconsin, channel,
  county
Concept docs: Tri-State Highway (disambiguation),
  Ocean-to-Ocean Highway (disambiguation), Highway 61 (disambiguation),
  Tri-County Airport (disambiguation), Tri-Cities Airport (disambiguation),
  Mid-Continent Airport (disambiguation), 99 Squadron (disambiguation),
  95th Squadron (disambiguation), 94 Squadron (disambiguation),
  92 Squadron (disambiguation)

Concept terms: disambiguation, nihilistic, recklessness, sullen, annealing,
  negativity, initialization, recapitulation, streetwise, pde, pounce,
  revisionism, hyperspace, sidestep, bandwagon
Concept docs: Nihilistic (disambiguation), Recklessness (disambiguation),
  Manjack (disambiguation), Wajid (disambiguation), Kopitar (disambiguation),
  Rocourt (disambiguation), QRG (disambiguation),
  Maimaicheng (disambiguation), Varen (disambiguation), Gvr (disambiguation)

Concept terms: department, commune, communes, insee, france, see, also,
```

```
    southwestern, oise, marne, moselle, manche, eure, aisne, isère
  Concept docs: Communes in France, Saint-Mard, Meurthe-et-Moselle,
    Saint-Firmin, Meurthe-et-Moselle, Saint-Clément, Meurthe-et-Moselle,
    Saint-Sardos, Lot-et-Garonne, Saint-Urcisse, Lot-et-Garonne, Saint-Sernin,
    Lot-et-Garonne, Saint-Robert, Lot-et-Garonne, Saint-Léon, Lot-et-Garonne,
    Saint-Astier, Lot-et-Garonne

  Concept terms: genus, species, moth, family, lepidoptera, beetle, bulbophyllum,
    snail, database, natural, find, geometridae, reference, museum, noctuidae
  Concept docs: Chelonia (genus), Palea (genus), Argiope (genus), Sphingini,
    Cribrilinidae, Tahla (genus), Gigartinales, Parapodia (genus),
    Alpina (moth), Arycanda (moth)

  Concept terms: province, district, municipality, census, rural, iran,
    romanize, population, infobox, azerbaijan, village, town, central,
    settlement, kerman
  Concept docs: New York State Senate elections, 2012,
    New York State Senate elections, 2008,
    New York State Senate elections, 2010,
    Alabama State House of Representatives elections, 2010,
    Albergaria-a-Velha, Municipalities of Italy, Municipality of Malmö,
    Delhi Municipality, Shanghai Municipality, Göteborg Municipality

  Concept terms: genus, species, district, moth, family, province, iran, rural,
    romanize, census, village, population, lepidoptera, beetle, bulbophyllum
  Concept docs: Chelonia (genus), Palea (genus), Argiope (genus), Sphingini,
    Tahla (genus), Cribrilinidae, Gigartinales, Alpina (moth), Arycanda (moth),
    Arauco (moth)

  Concept terms: protein, football, league, encode, gene, play, team, bear,
    season, player, club, reading, human, footballer, cup
  Concept docs: Protein FAM186B, ARL6IP1, HIP1R, SGIP1, MTMR3,
    Gem-associated protein 6, Gem-associated protein 7, C2orf30, OS9 (gene),
    RP2 (gene)
```

前两个概念还是有些模糊，但其他概念看起来可以代表一些有意义的类别。第三个概念看起来像是法国的某些地方。第四个和第六个概念分别为动物和虫子的分类。第五个是关于选举、城市和政府的。第七个概念对应的文章是关于蛋白质的，但有些词项与足球相关，或许牵扯到了提升健美效果的药物？虽然每个概念都有一些让人费解的词出现，但所有概念都显示出一定程度上的主题连贯性。

6.8 基于低维近似的查询和评分

词项与文档之间的相关度如何？词项与词项之间的相关度如何？与一组查询项最相关的文档是哪些？原始的词项 – 文档矩阵为解决这些问题提供了一个简单的方法。我们可以通过计算矩阵中两个列向量之间的余弦相似度得到两个词项的相关度得分。*余弦相似度*度量了两个向量之间的夹角。在高维文档空间中，方向相同的两个向量彼此是相关的。两个向量的余弦相似度可以通过它们的点积除以向量的长度来得到。自然语言处理和信息检索应用

广泛采用余弦相似度作为度量词项和文档权重向量相似性的指标。类似地，对两个文档的相关度得分可以通过这两个文档对应的两个行向量之间的余弦相似度来计算。词项和文档之间的相关度得分就更简单了，就是矩阵中相应行列的相交点。

但是，上述相似度计算是基于词项和文档相互关系的粗浅理解，依赖简单的频率计算。LSA 算法可以基于对语料库更深层次的理解来计算相似度得分。举个例子来说，如果词项 artillery 在文章“Normandy landings”没有出现，但 LSA 算法可以根据 artillery 和 howitzer 在其他文档中同时出现来发掘 artillery 和文章的关系。

LSA 算法的另一个优点就是效率高。它将重要信息表示为低维向量，这样我们就不用处理原始的词项 – 文档矩阵。考虑给定一个词项寻找与之最相关的其他词项的问题。如果采用前面提到的粗浅方法，我们需要计算词项列向量和词项 – 文档矩阵中所有其他列向量的点积。这里需要的乘法运行次数和词项个数与文档个数的乘积成正比。通过采用概念空间的表示并将其映射回词项空间，LSA 算法可以达到相同的效果，但乘法运算的次数与词项个数和 k 的乘积成正比。低阶近似对数据相关模式进行了编码，所以我们无需查询整个语料库。

6.9 词项–词项相关度

LSA 将词项之间的关系解释为重构出来的低阶近似阵中的两个列之间的余弦相似度。也就是说，该矩阵可以通过将三个近似因子阵相乘得到。LSA 算法背后的思想是这个低阶矩阵是对数据更有用的表示。这些用途表现在以下几个方面：

- 通过合并相关词项来处理同义词
- 通过对词项的不同含义赋予低的权重来处理多义词
- 过滤噪声

但是，要得到余弦相似度并不一定需要计算出矩阵的元素。线性代数运算告诉我们重构矩阵中的两个列的余弦相似度正好等于 $S\ V^T$ 的相应列的余弦相似度。考虑寻找一个词项最相关的一组词项的问题。计算词项与其他所有词项之间的余弦相似度等价于先将 $V\ S$ 中的每一行归一化，然后乘以词项对应的行。得到的结果向量中每个元素代表了词项与查询项之间的相似度。

为了节省篇幅，我们省略了计算 $V\ S$ 和行归一化方法的实现代码，大家可以参考本书附带 GitHub 资料库：

```
import breeze.linalg.{DenseVector => BDenseVector}
import breeze.linalg.{DenseMatrix => BDenseMatrix}

def topTermsForTerm(
    normalizedVS: BDenseMatrix[Double],
```

```
    termId: Int): Seq[(Double, Int)] = {
  val rowVec = new BDenseVector[Double](
    row(normalizedVS, termId).toArray) ❶

  val termScores = (normalizedVS * rowVec).toArray.zipWithIndex  ❷

  termScores.sortBy(-_._1).take(10) ❸
}

val VS = multiplyByDiagonalMatrix(svd.V, svd.s)

val normalizedVS = rowsNormalized(VS)

def printRelevantTerms(term: String) {
  val id = idTerms(term)
  printIdWeights(topTermsForTerm(normalizedVS, id, termIds)
}
```

❶ 在 *VS* 中查询给定词项 ID 对应的行。

❷ 计算每个词项的得分。

❸ 找出最高得分的词项。

下面是一些样例词项的最相关的词项得分情况：

```
printRelevantTerms("algorithm")

(algorithm,1.000000000000002), (heuristic,0.8773199836391916),
(compute,0.8561015487853708), (constraint,0.8370707630657652),
(optimization,0.8331940333186296), (complexity,0.823738607119692),
(algorithmic,0.8227315888559854), (iterative,0.822364922633442),
(recursive,0.8176921180556759), (minimization,0.8160188481409465)

printRelevantTerms("radiohead")

(radiohead,0.9999999999999993), (lyrically,0.8837403315233519),
(catchy,0.8780717902060333), (riff,0.861326571452104),
(lyricsthe,0.8460798060853993), (lyric,0.8434937575368959),
(upbeat,0.8410212279939793), (song,0.8280655506697948),
(musically,0.8239497926624353), (anthemic,0.8207874883055177)

printRelevantTerms("tarantino")

(tarantino,1.0), (soderbergh,0.780999345687437),
(buscemi,0.7386998898933894), (screenplay,0.7347041267543623),
(spielberg,0.7342534745182226), (dicaprio,0.7279146798149239),
(filmmaking,0.7261103750076819), (lumet,0.7259812377657624),
(directorial,0.7195131565316943), (biopic,0.7164037755577743)
```

6.10 文档–文档相关度

同样可以计算文档之间的相关度。要计算两个文档之间的相似度，只要计算 $u_1^{T}S$ 和 $u_2^{T}S$ 之

间的余弦相似度，这里 u_i 是 U 中词项 i 对应的行。要计算一个文档和其他所有文档的相似度，只要计算规范化的 $(U S)\ u_t$。

由于 U 背后是一个 RDD，而不是本地矩阵，所以这里的实现方法稍有不同：

```
import org.apache.spark.mllib.linalg.Matrices

def topDocsForDoc(normalizedUS: RowMatrix, docId: Long)
  : Seq[(Double, Long)] = {
  val docRowArr = row(normalizedUS, docId) ❶
  val docRowVec = Matrices.dense(docRowArr.length, 1, docRowArr)

  val docScores = normalizedUS.multiply(docRowVec) ❷

  val allDocWeights = docScores.rows.map(_.toArray(0)).
    zipWithUniqueId() ❸

  allDocWeights.filter(!_._1.isNaN).top(10) ❹
}
val US = multiplyByDiagonalMatrix(svd.U, svd.s)

val normalizedUS = rowsNormalized(US)

def printRelevantDocs(doc: String) {
  val id = idDocs(doc)
  printIdWeights(topDocsForDoc(normalizedUS, id, docIds)
}
```

❶ 在 *US* 中查找给定 doc ID 对应的行。

❷ 计算每个文档的得分。

❸ 找出得分最高的文档。

❹ 如果 U 中对应行元素全为 0，则文档得分可能是 NaN。所以我们需要将这些行去掉。

下面给出一些样例文档的最相似的文档：

```
printRelevantDocs("Romania")

(Romania,0.9999999999999994), (Roma in Romania,0.9229332158078395),
(Kingdom of Romania,0.9176138537751187),
(Anti-Romanian discrimination,0.9131983116426412),
(Timeline of Romanian history,0.9124093989500675),
(Romania and the euro,0.9123191881625798),
(History of Romania,0.9095848558045102),
(Romania–United States relations,0.9016913779787574),
(Wiesel Commission,0.9016106300096606),
(List of Romania-related topics,0.8981305676612493)

printRelevantDocs("Brad Pitt")

(Brad Pitt,0.9999999999999984), (Aaron Eckhart,0.8935447577397551),
```

```
(Leonardo DiCaprio,0.8930359829082504), (Winona Ryder,0.8903497762653693),
(Ryan Phillippe,0.8847178312465214), (Claudette Colbert,0.8812403821804665),
(Clint Eastwood,0.8785765085978459), (Reese Witherspoon,0.876540742663427),
(Meryl Streep in the 2000s,0.8751593996242115),
(Kate Winslet,0.873124888198288)

printRelevantDocs("Radiohead")

(Radiohead,1.0000000000000016), (Fightstar,0.9461712602479349),
(R.E.M.,0.9456251852095919), (Incubus (band),0.9434650141836163),
(Audioslave,0.9411291455765148), (Tonic (band),0.9374518874425788),
(Depeche Mode,0.9370085419199352), (Megadeth,0.9355302294384438),
(Alice in Chains,0.9347862053793862), (Blur (band),0.9347436350811016)
```

6.11 词项–文档相关度

怎样计算词项和文档之间的相关度？这等价于计算词项 – 文档矩阵的低阶近似阵相应词项与文档对应的元素，即 $u_d^T\ S\ v_t$，其中 u_d 是 U 中文档对应的行，v_t 是 V 中词项对应的行。经过简单的线性代数运算就可以看出，词项和每个文档的相似度就是 $U\ S\ v_t$。结果向量中的每个元素代表文档与查询项之间的相似度。另一个方向上文档与每个词项的相似度是 $u_d^T\ S\ V$：

```
def topDocsForTerm(US: RowMatrix, V: Matrix, termId: Int)
  : Seq[(Double, Long)] = {
  val rowArr = row(V, termId).toArray
  val rowVec = Matrices.dense(termRowArr.length, 1, termRowArr)

  val docScores = US.multiply(termRowVec) ❶

  val allDocWeights = docScores.rows.map(_.toArray(0)).
    zipWithUniqueId() ❷
  allDocWeights.top(10)
}

def printRelevantDocs(term: String) {
  val id = idTerms(term)
  printIdWeights(topDocsForTerm(normalizedUS, svd.V, id, docIds)
}
```

❶ 计算每个文档的得分。

❷ 找出得分最高的文档。

```
printRelevantDocs("fir")

(Silver tree,0.006292909647173194),
(See the forest for the trees,0.004785047583508223),
(Eucalyptus tree,0.004592837783089319),
(Sequoia tree,0.004497446632469554),
(Willow tree,0.004442871594515006),
(Coniferous tree,0.004429936059594164),
```

```
(Tulip Tree,0.004420469113273123),
(National tree,0.004381572286629475),
(Cottonwood tree,0.004374705020233878),
(Juniper Tree,0.004370895085141889)

printRelevantDocs("graph")

(K-factor (graph theory),0.07074443599385992),
(Mesh Graph,0.05843133228896666), (Mesh graph,0.05843133228896666),
(Grid Graph,0.05762071784234877), (Grid graph,0.05762071784234877),
(Graph factor,0.056799669054782564), (Graph (economics),0.05603848473056094),
(Skin graph,0.05512936759365371), (Edgeless graph,0.05507918292342141),
(Traversable graph,0.05507918292342141)
```

6.12　多词项查询

最后，我们该怎样实现多个词项的查询？找到与单个词项相关的文档只需从 V 中选出与该词项相应的行。这等价于用只有一个非零元素的词向量乘以 V。相反，如果是多个词项，只要用包含多个非零元素的词向量乘以 V，从而计算出概念 – 空间向量。为了保持原始词项 – 文档矩阵的权重机制，将查询中的词项权重值设为词项的逆文档频率。从某种意义上说，这种查询方式就像是先在只有几个词项的语料库中增加文档，将该文档对应低阶近似词项 – 文档矩阵的一行，然后求该行与矩阵中其他行的余弦相似度。

```
import breeze.linalg.{SparseVector => BSparseVector}

def termsToQueryVector(
    terms: Seq[String],
    idTerms: Map[String, Int],
    idfs: Map[String, Double]): BSparseVector[Double] = {
  val indices = terms.map(idTerms(_)).toArray
  val values = terms.map(idfs(_)).toArray
  new BSparseVector[Double](indices, values, idTerms.size)
}

def topDocsForTermQuery(
    US: RowMatrix,
    V: Matrix,
    query: BSparseVector[Double]): Seq[(Double, Long)] = {
  val breezeV = new BDenseMatrix[Double](V.numRows, V.numCols,
    V.toArray)
  val termRowArr = (breezeV.t * query).toArray

  val termRowVec = Matrices.dense(termRowArr.length, 1, termRowArr)

  val docScores = US.multiply(termRowVec) ❶

  val allDocWeights = docScores.rows.map(_.toArray(0)).
    zipWithUniqueId() ❷
  allDocWeights.top(10)
}
```

```
def printRelevantDocs(terms: Seq[String]) {
  val queryVec = termsToQueryVector(terms, idTerms, idfs)
  printIdWeights(topDocsForTermQuery(US, svd.V, queryVec), docIds)
}
```

❶ 计算每个文档的得分。

❷ 找出得分最高的文档。

```
printRelevantDocs(Seq("factorization", "decomposition"))

(K-factor (graph theory),0.04335677416674133),
(Matrix Algebra,0.038074479507460755),
(Matrix algebra,0.038074479507460755),
(Zero Theorem,0.03758005783639301),
(Birkhoff-von Neumann Theorem,0.03594539874814679),
(Enumeration theorem,0.03498444607374629),
(Pythagoras' theorem,0.03489110483887526),
(Thales theorem,0.03481592682203685),
(Cpt theorem,0.03478175099368145),
(Fuss' theorem,0.034739350150484904)
```

6.13 小结

除了用于文本分析，奇异值分解和它的姊妹技术主成分分析，还有其他很多应用。*特征脸*（eigenface）是人脸识别的常用方法，它采用了这种技术来理解人类脸部的不同模式。在气象学研究中，可以使用这个技术从包含噪声的不同数据源中发现类似年轮一样的全球气温变化趋势。著名的 Michael Mann 曲棍球棒图（http://en.wikipedia.org/wiki/Hockey_stick_controversy）描绘了整个 20 世纪气温升高的规律，这其实就是所谓的*概念*。奇异值分解和 PCA 算法也用于高维数据集的可视化。但一个数据集被归约为最重要的两到三个概念后，我们就可以将它绘制成人类可以观察的图形了。

还有许多其他方法可以用于理解海量文本语料库。比如潜在狄氏配置（LDA，Latent Dirichlet Allocation，http://en.wikipedia.org/wiki/Latent_Dirichlet_allocation）就是其中一种技术。作为一个*话题模型*，该技术可以从语料库中推断出一组话题并计算出每个文档参与该话题的程度。

第7章

用GraphX分析伴生网络

作者：Josh Wills

> 这是一个小世界，一个不断穿越自身的小世界。
>
> ——David Mitchell

数据科学家形形色色，其学术背景也大相径庭。他们大部分具有计算机科学、数学和物理学背景，但也有不少成功的数据科学家具有神经学、社会学和政治学背景。尽管这些研究领域研究的内容各不相同（比如有的研究大脑，有的研究人类，还有的研究政治机构），也不要求学生学习编程，但它们有两个共同的特点，这两个共同点使得这些领域盛产数据科学家。

第一，这些领域都需要理解实体间的*关系*，不论是神经元之间的关系，还是人类个体之间的关系，抑或是国家与国家之间的关系，而且都需要知道这些关系如何影响实体的具体行为。第二，随着过去十年电子数据的爆炸式增长，研究人员可以获得有关这些关系的海量信息，而这些海量数据要求他们具备获取和管理这些数据的新技能。

随着这些研究人员之间以及研究人员与计算机科学家之间合作的增多，他们发现许多关系分析技术也能用于解决其他跨领域的问题。于是，以图论为工具的*网络科学*（network science）就诞生了。图论是一个数学学科，研究一组实体（称为*顶点*）之间两两关系（称为*边*）的特点。图论也被广泛应用于计算机科学，比如研究数据结构、计算机架构和网络设计（比如因特网等）。

图论和网络科学也对商业领域产生了深远影响。几乎所有大型互联网公司都建立了关系网络，通过对这些重要的关系网络进行分析，这些公司获得了巨大的价值和更多的竞争优势。亚马逊和 Netflix 分别建立并掌握了顾客 – 商品购买关系和用户 – 电影评分关系，并且基于这些关系构建各自的推荐算法。Facebook 和 LinkedIn 则构建了人类关系图谱并对这些关系进行分析，目的就是为了更好地组织内容、提升广告效果以及帮助人们建立新的关系。在构建关系网络方面，最有名的例子可能要数谷歌创始人发明的 PageRank 算法，该算法从根本上改善了万维网的搜索方式。

这些以网络为中心的公司的计算和分析需求促使了 MapReduce 等分布式处理框架的产生。与此同时，这些公司也雇用了许多数据科学家，使用这些工具对越来越多的数据进行更快的分析。MapReduce 框架最初就是为了求解 PageRank 算法核心方程式设计的，该框架提供了一种可扩展和可靠的方式。随着图谱越来越大，数据科学家需要更快地进行分析，于是不断有新的并行图处理框架被开发出来，比如谷歌的 Pregel、雅虎的 Giraph 和卡内基梅隆大学的 GraphLab。这些框架以图处理为中心，支持容错和迭代式内存计算，对某些类型的图计算的处理效率大大高于对应的数据并行式 MapReduce 作业。

本章将介绍 Spark 之上的一个扩展工具 GraphX，它支持 Pregel、Giraph 和 GraphLab 中的许多图并行处理任务。相比于 Pregel、Giraph 和 GraphLab 这些定制的图计算框架，GraphX 无法在每个图计算上都与它们一样快，但由于 GraphX 基于 Spark，在进行数据分析过程中，如果你想引入 GraphX 对以网络为中心的数据集进行分析是非常方便的。有了 GraphX，你能够像往常一样使用熟悉的 Spark 抽象来进行图并行编程。

7.1 对MEDLINE文献引用索引的网络分析

MEDLINE（Medical Literature Analysis and Retrieval System Online，医学文献在线分析和检索系统）是一个学术论文数据库，收录发表在生命科学和医学领域期刊上的文献。MEDLINE 由美国国家卫生研究院（National Institute of Health，NIH）下属的国家医学图书馆（National Library of Medicine，NLM）管理并发行。它的文献引用索引记录了数千种期刊上发表的论文，最早论文的可以追溯到 1879 年。从 1971 年开始 MEDLINE 对医科学校提供在线访问，从 1996 年开始通过万维网对普通公众开放。主数据库收录了两千多万篇文章，其中最早的文章发表在 20 世纪 50 年代初期，该数据库每个工作日都更新。

由于 MEDLINE 引用量非常大而且更新频率快，研究人员在所有文献引用索引上开发了一套全面的语义标签，称为 MeSH（Medical Subject Headings）。这些标签提供了一个有用的框架，使用 MeSH，人们就可以在阅读文献时知道文献之间的关系。同时人们基于 MeSH 开发了许多数据产品：2001 年 PubGene 向人们展示了第一个生物医学文本挖掘的生产应用。这是一个搜索引擎，人们可以利用它查看 MeSH 术语的关系图谱，而正是这个图谱将文档连接在一起。

本章我们将使用 Scala、Spark 和 GraphX 来获取、转换并分析 MeSH 术语网络，这些术语来自 MEDLINE 近期公开的引用数据子集。我们的网络分析思想来自于 Kastrin 等于 2014 年发表的论文“Large-Scale Structure of a Network of Co-Occurring MeSH Terms: Statistical Analysis of Macroscopic Properties”。但我们使用了一个不同的引用数据子集，同时原论文中采用的是 R 工具包和 C++ 代码，我们这里使用 GraphX。

我们的目的是了解文献引用图谱的概况和特点。为了实现这个目标，我们要从多个角度来研究数据集，这样才能全面了解数据集。首先，我们研究数据集中的主要主题和它们的伴生关系，这个分析比较简单，不需要使用 GraphX。然后，我们要找出数据集中的*连通组件*（connected component）。我们能不能沿着一条引用路径从一个主题达到另一个主题？数据实际上是不是由一系列独立的子图组成的？这些都是我们要回答的问题。接下来，我们会继续讨论图的*度分布*，它描述了主题的相关度变化并有助于我们找到那些与其他主题关联最多的主题。最后，我们要计算两个图统计量：*聚类系数*和*平均路径长度*，它们的复杂度稍微高一点儿。这些统计量有助于我们了解文献引用图谱与万维网和 Facebook 社交网络等实际图谱的相似程度。

7.2 获取数据

我们可以从 NIH 的 FTP 服务器上下载文献引用数据的一个样本，脚本如下：

```
$ mkdir medline_data
$ cd medline_data
$ wget ftp://ftp.nlm.nih.gov/nlmdata/sample/medline/*.gz
```

解压并检查数据，然后将数据上传到 HDFS 上，代码如下：

```
$ gunzip *.gz
$ ls -ltr
...
total 843232
-rw-r--r-- 1 spark spark 162130087 Dec 17  2013 medsamp2014h.xml
-rw-r--r-- 1 spark spark 146357238 Dec 17  2013 medsamp2014g.xml
-rw-r--r-- 1 spark spark 132427298 Dec 17  2013 medsamp2014f.xml
-rw-r--r-- 1 spark spark 102401546 Dec 17  2013 medsamp2014e.xml
-rw-r--r-- 1 spark spark 102715615 Dec 17  2013 medsamp2014d.xml
-rw-r--r-- 1 spark spark  89355057 Dec 17  2013 medsamp2014c.xml
-rw-r--r-- 1 spark spark  69209079 Dec 17  2013 medsamp2014b.xml
-rw-r--r-- 1 spark spark  58856903 Dec 17  2013 medsamp2014a.xml
```

样本数据格式为 XML，解压之后大约有 600 MB。样本文件中每个条目是一条 `MedlineCitation` 类型的记录，该记录包含文章在生物医学杂志上的发表信息，包括杂志名称、发行期号、发行日期、作者姓名、摘要、MeSH 关键字集合。此外，MeSH 关键字还有一个属性，用于表示该关键字所指概念是不是文章主要的主题。我们来看看 medsamp2014a.xml 文件中第一个引用记录：

```
<MedlineCitation Owner="PIP" Status="MEDLINE">
<PMID Version="1">12255379</PMID>
<DateCreated>
  <Year>1980</Year>
  <Month>01</Month>
  <Day>03</Day>
</DateCreated>
...
<MeshHeadingList>
...
  <MeshHeading>
    <DescriptorName MajorTopicYN="N">Intelligence</DescriptorName>
  </MeshHeading>
  <MeshHeading>
    <DescriptorName MajorTopicYN="Y">Maternal-Fetal Exchange</DescriptorName>
  </MeshHeading>
...
</MeshHeadingList>
...
</MedlineCitation>
```

前一章在对维基百科文章进行潜在语义分析时，我们主要关心 XML 记录中的非结构化文本。但对本章中伴生关系的分析，我们直接通过解析 XML 结构并从 `DescriptorName` 标签中提取值。幸运的是，Scala 提供了一个非常优秀的工具 scala-xml，可以直接用它来解析和查询 XML 文档。

先将引用数据加载到 HDFS 上：

```
$ hadoop fs -mkdir medline
$ hadoop fs -put *.xml medline
```

现在启动 Spark shell。本章要用到第 6 章解析 XML 格式数据的代码。为了将这些代码编译成一个可供引用的 JAR，需要先到 Git 资料库上的 common/ 目录下并执行 Maven 构建：

```
$ cd common/
$ mvn package
$ spark-shell --jars target/common-1.0.0.jar
```

为了把 XML 格式的 MEDLINE 数据读到 Spark shell 中，我们需要实现一个的函数，代码如下：

```
import com.cloudera.datascience.common.XmlInputFormat
import org.apache.spark.SparkContext
import org.apache.hadoop.io.{Text, LongWritable}
import org.apache.hadoop.conf.Configuration

def loadMedline(sc: SparkContext, path: String) = {
  @transient val conf = new Configuration()
  conf.set(XmlInputFormat.START_TAG_KEY, "<MedlineCitation ")
  conf.set(XmlInputFormat.END_TAG_KEY, "</MedlineCitation>")
  val in = sc.newAPIHadoopFile(path, classOf[XmlInputFormat],
```

```
        classOf[LongWritable], classOf[Text], conf)
    in.map(line => line._2.toString)
  }
  val medline_raw = loadMedline(sc, "medline")
```

由于不同记录中 MedlineCitation 开始标签中属性值可能不同，所以我们将配置参数 START_TAG_KEY 的值设为 MedlineCitation 开始标签的前缀。XmlInputFormat 会在返回的记录值中包含这些不同的属性。

7.3 用Scala XML工具解析XML文档

Scala 和 XML 之间有一段渊源比较有意思。从 1.2 版本开始 Scala 就把 XML 作为它的一级数据类型，所以下面这段代码的句法是没问题的：

```
import scala.xml._

val cit = <MedlineCitation>data</MedlineCitation>
```

这种对 XML 字面量的支持在主流编程语言中不多见，特别是像 JSON 这类序列化格式被广泛采用之后。对此，Martin Odersky 在 2012 年 Scala 语言邮件列表中作出如下评论：

> [XML 字面量] 在当时是个不错的特性，但现在看起来它有点儿不合时宜。相信有了新的字符串插入方案后，就可以把所有 XML 处理代码都放到库里了，这应该是个不小的进步。

从 Scala 2.11 开始，scala.xml 包不再包含在 Scala 核心库之中。在将 Scala 升级到 Scala 2.11 之后，如果需要在项目中使用 Scala XML 工具包，我们必须显式地将 scala-xml 依赖包包含进来。

记住上述注意点之后，我们必须承认 Scala 对 XML 文档的解析和查询真的非常优秀，从 MEDLINE 引用数据中提取信息时我们要反复利用这种优点。现在就开始把第一条未解析的引用记录提取到我们的 Spark shell 中吧：

```
val raw_xml = medline_raw.take(1)(0)
val elem = XML.loadString(raw_xml)
```

变量 elem 是 scala.xml.Elem 类的实例，Scala 用 scala.xml.Elem 类表示 XML 文档中的一个节点，该类内置了查询节点信息和节点内容的函数，比如：

```
elem.label
elem.attributes
```

它也提供了查找给定 XML 节点子节点的几个运算符，其中第一个就是 \，用于根据名称查询节点的直接子节点：

```
elem \ "MeshHeadingList"
...
NodeSeq(<MeshHeadingList>
<MeshHeading>
<DescriptorName MajorTopicYN="N">Behavior</DescriptorName>
</MeshHeading>
...
```

运算符 \ 只对节点的直接子节点有效，如果我们运行 `elem \ "MeshHeading"`，结果会是一个空的 `NodeSeq`。为了得到给定节点的间接子节点，我们要用运算符 \\：

```
elem \\ "MeshHeading"
...
NodeSeq(<MeshHeading>
<DescriptorName MajorTopicYN="N">Behavior</DescriptorName>
</MeshHeading>,
...
```

可以用 \\ 运算符直接得到 `DescriptorName` 条目，并通过在每个 `NodeSeq` 内部元素上调用 `text` 函数把每个节点内的 MeSH 标签提取出来：

```
(elem \\ "DescriptorName").map(_.text)
...
List(Behavior, Congenital Abnormalities, ...
```

最后请注意，每个 `DescriptorName` 条目都有一个 `MajorTopicYN` 属性，它表示该 MeSH 标签是否是所引用的文章的主要主题。只要我们在 XML 标签属性前加上“@”符号，就可以用 \ 和 \\ 运算符得到 XML 标签属性的值。用这个特性我们可以建立一个过滤器，只返回文章的主要 MeSH 标签的名称，代码如下：

```
def majorTopics(elem: Elem): Seq[String] = {
  val dn = elem \\ "DescriptorName"
  val mt = dn.filter(n => (n \ "@MajorTopicYN").text == "Y")
  mt.map(n => n.text)
}
majorTopics(elem)
```

现在我们的 XML 解析代码可以在本地运行了，我们可以用它解析 RDD 中每条引用记录的 MeSH 编码并将结果缓存起来：

```
val mxml: RDD[Elem] = medline_raw.map(XML.loadString)
val medline: RDD[Seq[String]] = mxml.map(majorTopics).cache()
medline.take(1)(0)
```

7.4 分析MeSH主要主题及其伴生关系

在将 MEDLINE 引用记录中所需的 MeSH 标签提取出来之后，我们需要知道数据集中标签的总体分布情况。为此我们需要计算一些基本统计量，比如记录条数和主要 MeSH 主题出

现频率的直方图，代码如下：

```
medline.count()
val topics: RDD[String] = medline.flatMap(mesh => mesh)
val topicCounts = topics.countByValue()
topicCounts.size
val tcSeq = topicCounts.toSeq
tcSeq.sortBy(_._2).reverse.take(10).foreach(println)
...
(Research,5591)
(Child,2235)
(Infant,1388)
(Toxicology,1251)
(Pharmacology,1242)
(Rats,1067)
(Adolescent,1025)
(Surgical Procedures, Operative,1011)
(Pregnancy,996)
(Pathology,967)
```

出现最频繁的主要主题是那些最常见的主题，比如超级常见的“Research”以及稍微弱一点儿的“Toxicology”“Pharmacology”和“Pathology”，这一点在我们的意料之中。常见主题列表中也包含了不同病例群体，比如“Child”“Infant”“Rats”或更让人讨厌的“Adolescent”。幸运的是，我们的数据集中有超过 13 000 个不同的主要主题，考虑到最常出现的主题只出现在了一小部分（5591/240 000，约为 2.3%）文档中，我们估计包含某个主题的文档的个数的总体分布呈现长尾形态。为了验证我们的估计，我们对 `topicCounts` 这个 map 中出现次数相同的主题的个数进行统计：

```
val valueDist = topicCounts.groupBy(_._2).mapValues(_.size)
valueDist.toSeq.sorted.take(10).foreach(println)
...
(1,2599)
(2,1398)
(3,935)
(4,761)
(5,592)
(6,461)
(7,413)
(8,394)
(9,345)
(10,297)
```

当然我们主要还是关心 MeSH 的伴生主题。MEDLINE 数据集中每一项都是一个字符串列表，代表每个引用记录中提及的主题名称。要得到伴生主题，我们要为这些字符串列表生成一个二元组集合。幸运的是，Scala 的集合工具包有一个 `combinations` 方法，利用这个方法产生这些子列表极其容易。`combinations` 方法返回的是一个 `Iterator`，因此并不需要同时把所有组合都放在内存里。

```
val list = List(1, 2, 3)
val combs = list.combinations(2)
combs.foreach(println)
```

当用这个函数来生成子列表时，我们要注意所有的列表要按照同样的方式进行排序，以便之后使用 Spark 对它们进行汇总。这是因为 `combinations` 函数返回的列表取决于输入元素的顺序，而元素相同但顺序不同的两个列表是不相等的。

```
val combs = list.reverse.combinations(2)
combs.foreach(println)
List(3, 2) == List(2, 3)
```

因此如果我们要为每条引用记录生成二元子列表集合，在调用 `combinations` 之前要确保主题列表是排好序的：

```
val topicPairs = medline.flatMap(t => t.sorted.combinations(2))
val cooccurs = topicPairs.map(p => (p, 1)).reduceByKey(_+_)
cooccurs.cache()
cooccurs.count()
```

由于我们的数据中有 13 034 个主题，总共可能有 13 034*13 033/2 = 84 936 061 个无序的伴生二元组。然而，伴生组的计数结果显示数据集中实际上只有 259 920 组，只占可能数量的很小一部分。如果考察一下数据中最常出现的伴生二元组，我们可以得到如下结果：

```
val ord = Ordering.by[(Seq[String], Int), Int](_._2)
cooccurs.top(10)(ord).foreach(println)
...
(List(Child, Infant),1097)
(List(Rats, Research),995)
(List(Pharmacology, Research),895)
(List(Rabbits, Research),581)
(List(Adolescent, Child),544)
(List(Mice, Research),505)
(List(Dogs, Research),469)
(List(Research, Toxicology),438)
(List(Biography as Topic, History),435)
(List(Metabolism, Research),414)
```

最常出现的伴生二元组也没有什么特别之处，如果我们根据最常出现的主要主题来猜测，结果也差不多。出现最多的伴生二元组比如 `(Child, Infant)` 和 `(Rats, Research)` 不过是出现最多的主题个体之间的两两组合。这一点不足为奇，除了说明数据中存在伴生二元组之外也没有提供什么额外信息。

7.5 用GraphX来建立一个伴生网络

正如在前一节中所看到的那样，在研究伴生网络时标准的数据统计工具不能提供额外有价值的信息。我们能计算的总体概要统计量，比如原始记录条数等，无法让我们了解网络中

关系的总体结构。并且运用这些工具得到的处于分布两端的伴生二元组常常是我们不太感兴趣的。

我们真正想要做的是把伴生网络作为网络来分析：把主题当作图的顶点，把连接两个主题的引用记录看成两个相应顶点之间的边。这样我们就可以计算以网络为中心的统计量。这些网络统计量能帮助我们理解网络的总体结构并识别出那些有意思的局部离群顶点，识别出这些离群点之后我们才需要对其进行进一步研究。

我们也可以利用伴生网络找出需要进一步研究的那些有意思的相互关系。图 7-1 是抗癌药物和病人服用药物所产生的不良反应的部分伴生关系图。我们可以利用从这些图中得到的信息设计临床实验并研究药物和不良反应的相互关系。

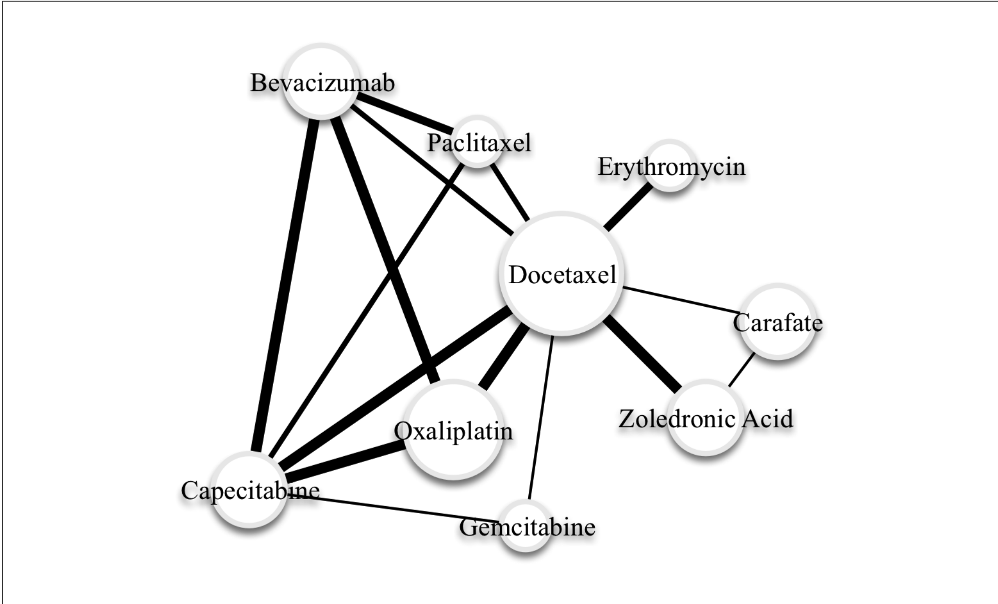


图 7-1：抗癌药物和相关病人不良反应组的部分伴生关系图

MLlib 对利用 Spark 建立机器学习模型提供了一组模式和算法。与之类似，设计 GraphX 这个 Spark 工具包是为了帮助我们利用图论的语言和工具分析各种网络。由于 GraphX 构建在 Spark 之上，它继承了 Spark 在可扩展性方面的所有特性。这就意味着可以利用 GraphX 对规模极其庞大的图进行分析，这些分析任务可以在多个机器上分布式执行。GraphX 也可以与 Spark 平台上的其他组件很好地集成在一起，这样数据科学家就能在各种任务中轻松切换：从编写运行在 RDD 之上的 ETL 任务切换到执行那些运行在图上的图并行算法，然后再切回到以数据并行的方式对图计算输出结果并进行分析和汇总。这一点我们将在本章中看到。GraphX 允许我们在分析过程中轻松引入图计算方式，正是因为这种无缝集成才使得 GraphX 变得如此强大。

GraphX 针对图计算对 RDD 的实现进行了两项特殊的优化。VertexRDD[VD] 是 RDD[(VertexId, VD)] 的特殊实现，其中 VertexID 类型是 Long 的实例，对每个顶点都是必需的。VD 是顶点关联的任何类型数据，称为*顶点属性*（vertex attribute）。EdgeRDD[ED] 是 RDD[Edge[ED]] 的特殊实现，其中 Edge 是包含两个 VertexId 值和一个 ED 类型的*边属性*（edge attribute）。VertexRDD 和 EdgeRDD 在每个数据分区内部均有用于加快连接和属性更新的索引结构。给定 VertexRDD 及其相应的 EdgeRDD 后，我们就能建立一个 Graph 类的实例，Graph 类包含了许多图计算的高效方法。

要建立一个图，首先要取得用作图顶点标识符的 Long 型值。由于所有主题都是用字符串标示的，因此我们在创建伴生网络时要处理这个小问题。我们需要有一种方式将每个主题字符串转换为 64 位的 Long 型值，而且这种方式最好能够分布式执行。这样就能对全部数据进行快速处理。

方法之一就是用内置的 hashCode 方法来对任意 Scala 对象产生一个 32 位整数。就本章要讨论的问题而言，我们的图只有 13 000 个顶点，这种方法可能行得通。但对于一个有数百万甚至是数千万顶点的图来说，发生哈希冲突的概率可能就太高了。因此我们选用谷歌开发的 Guava 库中的 Hashing 工具。利用该工具，可以通过 MD5 哈希算法为每个主题生成一个 64 位的唯一标识符，代码如下：

```
import com.google.common.hash.Hashing

def hashId(str: String) = {
  Hashing.md5().hashString(str).asLong()
}
```

在 MEDLINE 数据上运行该哈希函数可以得到一个 RDD[(Long, String)]，以它为基础就可以得到伴生关系图的顶点集合。我们还需要对结果进行简单的校验以确保每个主题的哈希标识符是唯一的，代码如下：

```
val vertices = topics.map(topic => (hashId(topic), topic))
val uniqueHashes = vertices.map(_._1).countByValue()
val uniqueTopics = vertices.map(_._2).countByValue()
uniqueHashes.size == uniqueTopics.size
```

我们要用前面一节中得到的伴生频率计数来生成图的边，方法是使用哈希函数将每个主题的名称映射到相应的顶点 ID。在生成边的时候一个好习惯就是要保证左边的 VertexId（GraphX 称为 src）要比右边的 VertexId（GraphX 称为 dst）小。虽然 GraphX 工具包中大多数算法都不要求 src 和 dst 之间有大小关系，但确实有几个算法存在这样的要求。因此最好在一开始时就保证大小顺序，这样的话就再也不用为此操心了。

```
import org.apache.spark.graphx._

val edges = cooccurs.map(p => {
  val (topics, cnt) = p
```

```
    val ids = topics.map(hashId).sorted
    Edge(ids(0), ids(1), cnt)
  })
```

把顶点和边都准备好之后就可以创建 Graph 实例了。我们需要将 Graph 缓存起来，这样便于后续处理时使用，代码如下：

```
val topicGraph = Graph(vertices, edges)
topicGraph.cache()
```

用于创建 Graph 实例的 vertices 和 edges 参数是普通的 RDD。我们甚至没有为保证每个主题实例的唯一性而对 vertices 进行去重。幸运的是，Graph API 帮我们完成了这项工作，它会将我们输入的 RDD 转换成一个 VertexRDD 和一个 EdgeRDD，这样顶点计数就是唯一的了：

```
vertices.count()
...
280823

topicGraph.vertices.count()
...
13034
```

注意，如果某两个顶点二元组在 EdgeRDD 中重复出现，Graph API 不会对其进行去重处理，这样 GraphX 就可以创建多图（multigraph），也就是相同的顶点之间可以用多条不同值的边。如果图顶点代表了有许多丰富涵义的对象，多图往往是很有用的。比如人或公司，他们之间就可能有许多不同的关系（比如朋友、家庭成员、顾客、合作伙伴等）。多图也可以让我们根据实际情况使用有向边或无向边。

7.6　理解网络结构

研究表的内容时我们可以快速算出列上的很多概要统计量，这样就能大概知道数据的结构并可以对问题域作进一步研究。研究图时，这个原则同样适用，只不过此时我们感兴趣的概要统计量稍有不同。Graph 类内置了计算这些概要统计量的方法，结合其他常规的 Spark RDD API，我们可以很轻松地了解到图的结构，这样就能为研究图提供方向。

7.6.1　连通组件

对于图来说，我们想了解的一个基本情况就是它是否是*连通图*。对于连通图中的任意两个顶点，它们之间都存在一条*路径*到达对方，路径就是连接两个顶点的一系列边。如果图是非连通的，那么我们可以将图划分成一组更小的子图，这样就可以分别对每个子图进行研究。

连通性是图的基本属性，所以很自然地 GraphX 内置了找出图的连通组件的方法。如果在

图上调用过 connectedComponents 方法，你就会注意到 Spark 会生成许多作业，等作业结束后，就会得到计算的结果：

```
val connectedComponentGraph: Graph[VertexId, Int] =
  topicGraph.connectedComponents()
```

请注意 connectedComponents 方法返回对象的类型，也是 Graph 类型实例，但顶点属性的类型是 VertexId，它是每个顶点所属连通组件的唯一标识符。想得到连通组件的个数和大小，我们可以在 VertexRDD 中的每个顶点的 VertexId 上调用 countByValue 这个可靠的方法。下面我们来定义一个列出所有连通组件并按大小进行排序的方法：

```
def sortedConnectedComponents(
    connectedComponents: Graph[VertexId, _])
  : Seq[(VertexId, Long)] = {
  val componentCounts = connectedComponents.vertices.map(_._2).
    countByValue
  componentCounts.toSeq.sortBy(_._2).reverse
}
```

我们先来看看有多少个连通组件，然后进一步看一下最大的 10 个连通组件，详细情况如下：

```
val componentCounts = sortedConnectedComponents(
  connectedComponentGraph)
componentCounts.size
...
1039

componentCounts.take(10).foreach(println)
...
(-9222594773437155629,11915)
(-6468702387578666337,4)
(-7038642868304457401,3)
(-7926343550108072887,3)
(-5914927920861094734,3)
(-4899133687675445365,3)
(-9022462685920786023,3)
(-7462290111155674971,3)
(-5504525564549659185,3)
(-7557628715678213859,3)
```

最大的连通组件包含了超过 90% 的顶点，第二大的连通组件包含了 4%，只占图的非常小的一部分。为了搞清楚为什么这些小组件没有和最大的组件连通，需要看一下它们的主题。为了查看小组件相关的主题的名称，需要将连通组件图对应的 VertexRDD 和原始概念图执行 join 操作。VertexRDD 提供了 innerJoin 转换，它利用了 GraphX 的内部数据结构，性能比常规 Spark 的 join 转换要好得多。innerJoin 方法需要我们提供一个函数，该函数的输入为 VertexID 和两个 VertexRDD 的内部数据，函数的返回值是一个新的 VertexRDD，它是 innerJoin 方法结果。对应到我们这里的情况，我们想要知道每个连通组件的概念的

名称，因此需要返回一个包含概念名称和组件 ID 的二元组：

```
val nameCID = topicGraph.vertices.
  innerJoin(connectedComponentGraph.vertices) {
    (topicId, name, componentId) => (name, componentId)
}
```

我们来看一下第二大连通组件的主题名称：

```
val c1 = nameCID.filter(x => x._2._2 == topComponentCounts(1)._2)
c1.collect().foreach(x => println(x._2._1))
...
Reverse Transcriptase Inhibitors
Zidovudine
Anti-HIV Agents
Nevirapine
```

在 Google 中搜索一下 Zidovudine 和 Nevirapine，可以找到维基百科上的 `Nevirapine` 条目，这个条目指出它们是治疗 HIV-1 这种最严重的 HIV 时结合使用的两种药物。

很奇怪这个子图并没有与最大子图中的其他与 HIV 或 AIDS 相关的主题连通。我们来看一下全体数据中提及 HIV 的主题的分布，详细情况如下：

```
val hiv = topics.filter(_.contains("HIV")).countByValue()
hiv.foreach(println)
...
(HIV Seronegativity,10)
(HIV Long Terminal Repeat,2)
(HIV Long-Term Survivors,1)
(HIV Integrase Inhibitors,1)
(HIV Infections,104)
(HIV-2,2)
(HIV Seroprevalence,6)
(Anti-HIV Agents,1)
(HIV-1,72)
(HIV,16)
(HIV Seropositivity,41)
```

这个图中独立的子条目看起来是人为造成的，这可能是对文献索引中某个引用条目，比如对 HIV-1，有人故意不使用那些重要主题的标签，这样原本可以和那个最大子图连通的论文就没法连通了。这里我们学到的一个新知识就是随着我们不断的加入论文引用数据，主题伴生网络就非常可能变成全连通图，并且没有什么重要理由让我们相信这个伴生网络会分解成独立的子图。

底层实现上，为了找出每个顶点所属的连通组件，`connectedComponents` 方法利用 `VertexId` 作为顶点唯一标识符在图上执行一些列式迭代计算。在计算的每个阶段，每个顶点把它所收到的最小 `VertexID` 广播到相邻节点。第一次迭代时，这个最小 `VertexID` 就是顶点自身的 ID，在随后的迭代中该最小 `VertexID` 通常会被更新掉。每个顶点都记录它所收到的 `VertexID` 的最小值，如果在某一次迭代中，所有顶点的最小 `VertexID` 都没有变化，那么连

通组件的计算就完成了，每个顶点都将分配给该顶点的最小 VertexID 所代表的组件。在图上的这种迭代式计算非常普遍，本章后面将介绍怎样使用这种迭代模式来计算其他图结构指标。

7.6.2 度的分布

连通图的结构可能有很多种。比如，它可能是一个节点和所有其他节点相连，而其他节点之间则不直接相连。如果我们去掉这个中心节点，图就散落成若干分离的顶点。图的结构也可能是每个顶点都只和两个其他顶点相连，整个组件形成一个巨大的环。

图 7-2 说明了同样的连通图，它们的度分布可能迥异。

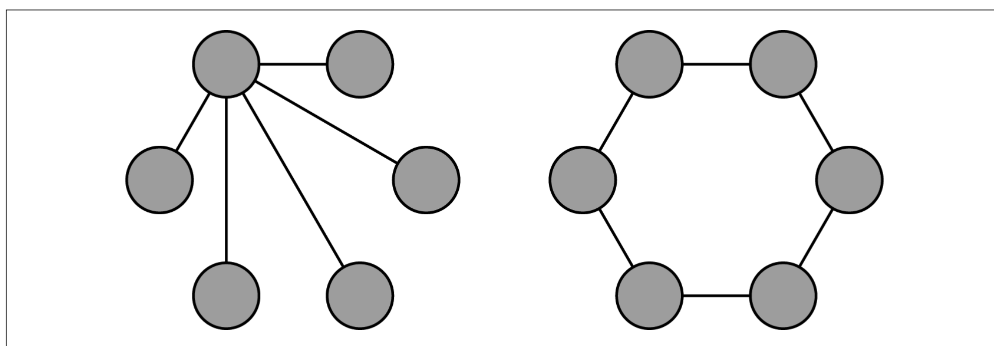


图 7-2：连通图的度分布

为了更多了解图的结构信息，我们需要知道每个顶点的度，也就是每个顶点所属边的条数。对于一个无环图（如果边的两个顶点相同就形成环），因为每条边都包含两个不同的顶点，所以全体顶点的度之和等于边的条数的两倍。

GraphX 中我们可以通过在 Graph 对象上调用 degrees 方法得到每个顶点的度。degrees 方法返回一个整数的 VertexRDD，其中每个整数代表一个顶点的度。现在我们来为概念网络计算度的分布和一些基本的概要统计量，代码如下：

```
val degrees: VertexRDD[Int] = topicGraph.degrees.cache()
degrees.map(_._2).stats()
...
(count: 12065, mean: 43.09,
 stdev: 97.63, max: 3753.0, min: 1.0)
```

度分布中有几个点要注意。第一，degrees RDD 中条目个数比概念图的顶点数少。概念图有 13 034 个顶点而 degrees RDD 只有 12 065 个条目。有些顶点没有连接边。这可能是由于 MEDLINE 数据中某些引用只有一个主要主题词，因此有些主题并不和其他任何主题同时出现。可以通过重新检查原始 RDD medline 来确认我们的推测，代码如下：

```
val sing = medline.filter(x => x.size == 1)
sing.count()
...
48611

val singTopic = sing.flatMap(topic => topic).distinct()
singTopic.count()
...
8084
```

有 8084 个不同主题词单独出现在 MEDLINE 数据库中的 48 611 篇文章中。现在我们将已经在 topicPairs RDD 出现过的这些主题词去掉，代码如下：

```
val topic2 = topicPairs.flatMap(p => p)
singTopic.subtract(topic2).count()
...
969
```

这会过滤掉 MEDLINE 数据库文档中单独出现的 969 个主题词。13 034 减去 969 等于 12 065，正好是 degrees RDD 中的条目数。

其次，请注意虽然度的均值较小，意味着普通顶点只连接到少数几个其他节点，但是度的最大值却表明至少有一个节点是高度连接的，它几乎和图中三分之一的顶点都是连接的。

我们来进一步看一下那些度很高的顶点所对应的概念，具体方法是使用 GraphX 的 innerJoin 在 degrees VertexRDD 和概念图中的顶点上执行 join 运算。这里我们还要提供一个关联函数将概念名称和顶点的度组织成一个二元组，请记住 innerJoin 方法只返回在两个 VertexRDD 中均出现的顶点，因此那些没有与其他概念同时出现的概念将被过滤掉。现在我们要编写一个函数用于查找那些度最高的顶点的概念名称，代码如下：

```
def topNamesAndDegrees(degrees: VertexRDD[Int],
    topicGraph: Graph[String, Int]): Array[(String, Int)] = {
  val namesAndDegrees = degrees.innerJoin(topicGraph.vertices) {
    (topicId, degree, name) => (name, degree)
  }
  val ord = Ordering.by[(String, Int), Int](_._2)
  namesAndDegrees.map(_._2).top(10)(ord)
}
```

如果我们打印出 namesAndDegrees VertexRDD 中度数最高的 10 个顶点，会得到如下结果：

```
topNamesAndDegrees(degrees, topicGraph).foreach(println)
...
(Research,3753)
(Child,2364)
(Toxicology,2019)
(Pharmacology,1891)
(Adolescent,1884)
(Pathology,1781)
```

```
(Rats,1573)
(Infant,1568)
(Geriatrics,1546)
(Pregnancy,1431)
```

这次分析中大部分度数较高的顶点与前文讨论过的那些常见概念并没有什么不同，这一点在我们的意料之中。下一节我们将会使用 GraphX API 提供的新功能和一些经典的统计量把那些没有什么意义的伴生二元组从图中过滤掉。

7.7 过滤噪声边

在当前的伴生图中，边的权重是基于一对概念同时出现在一篇论文中的频率来计算的。这种简单的权重机制的问题在于，它并没有对一对概念同时出现的原因加以区分，有时一对概念同时出现是因为它们具有某种值得我们关注的语义关系，但有时一对概念同时出现只是因为它们都频繁地出现在所有文档中，同时出现只是碰巧而已。我们需要使用一种新的权重机制，在给定概念在数据中的总体频繁度的情况下，它需要考虑给定的两个概念对于一个文档的"意义"或"新颖度"。我们将使用皮尔逊卡方测试（Pearson's chi-squared test）来严格计算这种"意义"，也就是说，我们要测试一个概念的出现与其他概念的出现是否是独立的。

对任何概念对 A 和 B，我们可以建立一个 2×2 的相关表，它包含了这两个概念同时出现在 MEDLINE 文档中的次数。

	Yes B	No B	B Total
Yes A	YY	YN	YA
No A	NY	NN	NA
B Total	YB	NB	T

该表中 YY、YN、NY 和 NN 代表概念 A 和 B 在文档中出现 / 没出现的原始次数。YA 和 NA 是概念 A 的按行合计的出现次数，YB 和 NB 是概念 B 按列合计的出现次数，值 T 则是文档的总数。

卡方测试时，我们可以把 YY、YN、NY 和 NN 看成某个未知分布的观测，可以根据这些值计算卡方统计量：

$$\chi^2 = T\ \frac{(YY*NN - YN*NY)^2}{YA*NA*YB*NB}$$

如果样本实际上是独立的，我们期望该统计量服从适当自由度的卡方分布。假定 r 和 c 是待比较的两个随机变量的基数，则自由度为 $(r-1)(c-1)=1$。卡方统计量大则表明随机变量相互独立的可能性小，因此两个概念同时出现是有意义的。更具体地讲，自由度为 1 的卡方分布的 CDF（累积分布函数）给出一个 p-value，它是我们拒绝变量是独立的这个备择假设的置信水平。

本节将使用 GraphX 来计算伴生图中每个概念对的卡方统计量。

7.7.1 处理EdgeTriplet

求卡方统计量时最简单的部分就是计算 T，也就是需要考虑的文档的总个数。只要简单数一下 medline RDD 中的条目个数就可以轻松地得到这个 T，代码如下：

```
val T = medline.count()
```

计算每个概念在多少篇文档中出现也相对简单，本章前面建立 topicCounts 这个 map 时已经讨论过，但我们现在需要将其表示为集群上的一个 RDD：

```
val topicCountsRdd = topics.map(x => (hashId(x), 1)).reduceByKey(_+_)
```

有了这个表示主题词出现次数的 VertexRDD，就可以把它作为顶点集合，再加上已有的 edges RDD 一起用来创建一个新图：

```
val topicCountGraph = Graph(topicCountsRdd, topicGraph.edges)
```

现在我们拥有计算 topicCountGraph 中每条边的卡方统计量所需的所有信息。计算卡方统计量，需要组合顶点数据（比如每个概念在一个文档中出现的次数）和边数据（比如两个概念同时出现在一个文档中的次数）。为了支持这种计算，GraphX 提供了一个数据结构 EdgeTriplet[VD, ED]，该数据结构将顶点和边的属性连同两个顶点的 ID 一起包装进一个对象。给定 topicCountGraph 上的一个 EdgeTriplet，就能算出卡方统计量，代码如下：

```
def chiSq(YY: Int, YB: Int, YA: Int, T: Long): Double = {
  val NB = T - YB
  val NA = T - YA
  val YN = YA - YY
  val NY = YB - YY
  val NN = T - NY - YN - YY
  val inner = (YY * NN - YN * NY) - T / 2.0
  T * math.pow(inner, 2) / (YA * NA * YB * NB)
}
```

然后可以用该方法通过 mapTriplets 算子转换边的值。mapTriplets 算子返回一个新图，这个图的边的属性就是每个伴生对的卡方统计量。于是我们就可以大概知道该统计量在所有边上的分布情况了：

```
val chiSquaredGraph = topicCountGraph.mapTriplets(triplet => {
  chiSq(triplet.attr, triplet.srcAttr, triplet.dstAttr, T)
})
chiSquaredGraph.edges.map(x => x.attr).stats()
...
(count: 259920, mean: 546.97,
 stdev: 3428.85, max: 222305.79, min: 0.0)
```

计算完卡方统计量，我们想用它去过滤那些没有意义的伴生概念对。从边的分布可以看出，数据中卡方统计量的范围很大，所以应该过滤掉更多的噪声边。对一个 2×2 的相关性表，如果变量没有相关性，我们期望卡方指标的值服从自由度为 1 的卡方分布。自由度为 1 的卡方分布的 99.999 百分位数大约为 19.5，因此我们将该值作为过滤边的阈值，这样过滤后图中就只剩下那些置信度非常高的有意义的伴生关系。我们将在图上利用 `subgraph` 方法进行过滤，这个方法接受 `EdgeTriplet` 的一个布尔函数，用以判断子图应该包含哪些边：

```
val interesting = chiSquaredGraph.subgraph(
  triplet => triplet.attr > 19.5)
interesting.edges.count
...
170664
```

我们采用的非常严格的过滤规则将原始伴生关系图中的约三分之一的边都排除在外。该规则没有将更多的边过滤掉，这不是件坏事，因为我们预期图中大多数伴生概念实际上是语义相关的，并且它们因此同时出现的次数较多，而不是碰巧。下一节我们将分析子图的连接度和总体度分布，目的是了解去掉噪声边是否会对图的结构造成重大影响。

7.7.2　分析去掉噪声边的子图

我们先在子图上运行连通组件算法，并检查组件个数和组件大小，这里我们使用了本章前面为原始图编写的函数：

```
val interestingComponentCounts = sortedConnectedComponents(
  interesting.connectedComponents())
interestingComponentCounts.size
...
1042

interestingComponentCounts.take(10).foreach(println)
...
(-9222594773437155629,11912)
(-6468702387578666337,4)
(-7038642868304457401,3)
(-7926343550108072887,3)
(-5914927920861094734,3)
(-4899133687675445365,3)
(-9022462685920786023,3)
(-7462290111155674971,3)
(-5504525564549659185,3)
(-7557628715678213859,3)
```

过滤掉三分之一的边对图的连通性影响很小：过滤之后，只是多了 3 个“孤岛”（过滤前有 1039 个组件，过滤之后有 1042 个组件）。这表明与最大的组件弱相关的三个概念在过滤过程中被裁剪掉了，经过过滤，它们形成了三个“孤岛”。最大的组件在过滤前后基本

保持不变，过滤掉三分之一的边并没有使最大的组件瓦解。这说明图的连通结构对噪声边过滤有较好的鲁棒性。检查一下过滤后图的度分布，情况也较为类似：

```
val interestingDegrees = interesting.degrees.cache()
interestingDegrees.map(_._2).stats()
...
(count: 12062, mean: 28.30,
 stdev: 44.84, max: 1603.0, min: 1.0)
```

过滤前顶点度的平均值约为 43，过滤后顶点度的平均值稍微小一些，约为 28。然而更值得注意的是，过滤前后顶点的最大度下降非常大，过滤前为 3753，过滤后为 1603。我们看一下过滤之后概念和度的关系，情况如下：

```
topNamesAndDegrees(interestingDegrees, topicGraph).foreach(println)
...
(Research,1603)
(Pharmacology,873)
(Toxicology,814)
(Rats,716)
(Pathology,704)
(Child,617)
(Metabolism,587)
(Rabbits,560)
(Mice,526)
(Adolescent,510)
```

看起来我们的卡方过滤准则效果不错：它在清除对应普遍概念的边的同时保留了代表概念之间有意义并且有值得注意的关系的那些边。我们可以继续用不同的卡方过滤准则进行试验，并且观察它们对图的连通性和度分布的影响。如果能找到卡方分布的某个值，并使用它作为过滤准则时，图中大型连通组件开始瓦解，这种尝试将是很有意义的。或者那个最大的组件只是不断“融化”，就像一座巨大的冰山随着时间慢慢消融。

7.8　小世界网络

图的连通性和度分布让我们了解了图的总体结构，而 GraphX 简化了这些属性的计算和分析。在这一节中我们将深入讲解 GraphX API 并介绍如何利用这些 API 来计算 GraphX 并不内置支持的图的一些高级属性。

随着计算机网络的崛起（比如万维网以及 Facebook 和 Twittert 等社交网络），数据科学家现在有了丰富的数据集。这些数据集描述了真实的网络结构和形态，而不是数学家和图论学家所研究的传统的理想模型。最早论述真实网络属性的论文之一就是 Duncan Watts 和 Steven Strogatz 于 1998 年发表的题为“Collective dynamics of‘small-world’networks”的论文（http://research.yahoo.com/files/w_s_NATURE_0.pdf）。这篇会议论文第一次为具有两个“小世界”属性的图提出了数学生成模型。现实生活中的图具有如下两个“小世界”属性。

- 网络中大部分节点的度都不高，它们与其他节点形成相对稠密的簇。也就是说，一个节点的邻接点大部分也是相连的。
- 虽然图中大部分节点的度不高而且属于相对稠密的簇，但只需经过少数几条边可能从一个网络节点快速到达另一个节点。

对上述两个属性，Watts 和 Strogatz 分别定义了一个指标，这样就可以根据图的指标强度对图进行排序。本节我们将用 GraphX 来对我们的概念网络计算这些指标，并且将得到的指标和理想随机图的这些指标进行比较，从而测试我们的概念网络是否具有小世界的属性。

7.8.1 系和聚类系数

如果对每个顶点都存在一条边使其与其他任何节点都相连，则这个图就是*完备的*。给定一个图，可能有多个顶点子集是完备的，我们把这些完备的子图称为*系*（clique）。图中存在许多大型的系表示该图具有某种局部稠密结构，我们发现真实的小世界网络也具有这种局部稠密结构。

不幸的是，在给定图中寻找系是非常困难的。判断一个图是否有给定大小的系是一个 NP-完备问题。也就是说，即使在一个小型的图中寻找系，其计算复杂度也是非常高的。

计算机科学家提出了许多简单的指标，利用这些指标可以较好地了解一个图的局部稠密性，而不用花费巨大的计算代价来寻找给定大小的图中所有的系。其中一个指标就是顶点的*三角计数*，*三角形*是一个完备图，顶点 V 的三角计数就是包含该顶点的三角形的个数。三角计数度量了 V 有多少个邻接点是相互连接的。Watts 和 Strogatz 定义了一个新的指标，称为*局部聚类系数*，它是一个顶点的实际三角计数与该顶点与其邻接点可能的三角计数的比率。对无向图来说，有 k 个邻接点和 t 个三角计数的顶点，其局部聚类系数 C 为：

$$C = \frac{2t}{k(k-1)}$$

现在我们用 GraphX 来计算过滤后的概念图的每个节点的局部聚类系数。GraphX 有一个内置方法 `triangleCount`，它返回一个 Graph 对象，其中 `VertexRDD` 包含了每个顶点的三角计数。

```
val triCountGraph = graph.triangleCount()
triCountGraph.vertices.map(x => x._2).stats()
...
(count: 13034, mean: 163.05,
  stdev: 616.56, max: 38602.0, min: 0.0)
```

要计算局部聚类系数，我们需要通过每个顶点可能的三角计数对该顶点的三角计数进行归一。每个顶点可能的三角计数可以从 `degrees` RDD 计算得出，代码如下：

```
val maxTrisGraph = graph.degrees.mapValues(d => d * (d - 1) / 2.0)
```

现在我们要把 triCountGraph 中包含三角计数的 VertexRDD 和上面得到的归一化 VertexRDD 进行联结，并计算二者的比率，在这个过程中，对那些只有一条边的顶点要注意避免零除问题：

```
val clusterCoefGraph = triCountGraph.vertices.
  innerJoin(maxTrisGraph) { (vertexId, triCount, maxTris) => {
    if (maxTris == 0) 0 else triCount / maxTris
  }
}
```

对图中所有顶点局部聚类系数取平均值，就得到网络平均聚类系数：

```
clusterCoefGraph.map(_._2).sum() / graph.vertices.count()
...
0.2784084744308219
```

7.8.2 用Pregel计算平均路径长度

小世界网络的第二个属性就是任何两个节点之间的最短路径是短的，本节我们将计算过滤之后的概念图中的大型连通组件节点的平均路径长度。

计算图中顶点之间的路径长度是一个迭代过程，和我们之前寻找连通组件的迭代过程类似。该过程的每个阶段，每个顶点将保留它所接触过的顶点列表并记录到这些顶点的距离。接着每个顶点都向其邻接点查询它对应的节点列表，如果发现该列表中有新的顶点，就用新节点更新自己的节点列表。查询邻接点并更新自己节点列表的过程一直继续下去，直到所有节点都没有发现有新节点需要添加为止。

这个在大规模分布式图上运行的以顶点为中心的迭代式并行计算方法，是以谷歌在 2009 年发表的题为“Pregel: a system for large-scale graph processing”的论文（http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1807184）为基础的。Pregel 早于 MapReduce 之前就已经提出，它基于一个称为“批量同步并行”（BSP，Bulk-Synchronous Parallel）的分布式计算模型。BSP 程序将并行处理阶段分成两个步骤：计算和通信。在计算环节，图中每个顶点检查自己的内部状态并决定是否向图中其他节点发送消息。在通信环节，Pregel 框架负责将计算环节得到的消息路由到相应的顶点，目标顶点处理接收到的消息之后更新自己的内部状态，并可能在下一个计算环节中产生新消息。计算和通信的过程会一直继续下去，直到图中所有顶点都一致投票同意停止运行，这时整个过程就结束了。

BSP 是最早的并行编程模型之一，它具有良好的通用性而且具有容错性，因此设计 BSP 系统时捕捉并保持任何计算阶段的系统状态是可能的。有了这些状态后，如果某台机器发生故障，就可以从其他机器上复制出发生故障的机器的状态，整个计算就可以回滚到故障发生前的状态，这样计算过程就可以继续下去。

自从谷歌发表了关于 Pregel 的论文之后，人们将 BSP 编程模型移植到 HDFS 之上并开发了

许多开源项目，其中包括 Apache Giraph 和 Apache Hama。实践证明这些系统对那些适用于 BSP 编程模型的特定问题非常有用，比如大规模 PageRank 运算。但是由于这些项目难以集成到标准的数据并行处理工作流中，所以它们并没有广泛地被数据科学家当作分析工具，也就没有被广泛部署。而 GraphX 解决了这个问题。由于 GraphX 可以方便地使用图来描述数据并设计算法来对图进行处理，因此数据科学家可以轻松地将图计算集成到数据并行处理工作流中，而且 GraphX 还提供了表达 BSP 运算的内置 `pregel` 运算符，这个算子是以图为基础的。本节我们将说明怎样使用这个运算符来实现对一个图的平均路径长度的计算，这是一个迭代式的图并行运算，包括：

(1) 分析出每个顶点需要记录的状态；
(2) 实现一个函数，需要考虑当前的状态并且根据两个相连顶点决定下一阶段要发送哪些消息；
(3) 实现一个函数，汇总来自不同顶点的所有消息，然后将函数的结果传递给顶点以便更新其状态。

使用 `pregel` 实现分布式算法时需要确定三个问题。第一，要确定用何种数据结构表示每个顶点状态和顶点之间传递的消息。对我们要解决的平均路径长度问题，我们希望每个顶点都有一个查询表，这个查询表包含当前顶点所知道的顶点的 ID 和它到这些顶点的距离。我们将为每个顶点建立一个 `Map[VertexId，Int]` 并把这些信息存储在其中。类似地，发送给每个顶点的消息也应该有一个查询表，该表包含顶点 ID 和距离。这个距离是根据邻接点传递过来的信息计算出来的，同样可以用 `Map[VertexId，Int]` 来表示这些信息。

确定了顶点状态和消息内容的数据结构之后，我们可以实现两个函数。第一函数是 `mergeMaps`，用于将新消息中的信息合并到顶点状态之中。对我们讨论的问题来说，顶点状态和消息都是 `Map[VertexId，Int]` 类型的，因此需要把两个 `map` 中的内容合并在一起并将每个 `VertexId` 关联到两个 `map` 中该 `VertexId` 对应两个条目的最小值。

```
def mergeMaps(m1: Map[VertexId, Int], m2: Map[VertexId, Int])
  : Map[VertexId, Int] = {
  def minThatExists(k: VertexId): Int = {
    math.min(
      m1.getOrElse(k, Int.MaxValue),
      m2.getOrElse(k, Int.MaxValue))
  }

  (m1.keySet ++ m2.keySet).map {
    k => (k, minThatExists(k))
  }.toMap
}
```

顶点的 `update` 函数同样有一个 `VertexId` 参数，因此我们定义一个很简单的函数，它有一个 `VertexId` 类型参数和一个 `Map[VertexId，Int]` 类型参数，但所有实质性的任务由 `mergeMaps` 代理执行，代码如下：

```
def update(
    id: VertexId,
    state: Map[VertexId, Int],
    msg: Map[VertexId, Int]) = {
  mergeMaps(state, msg)
}
```

因为我们在算法执行过程中传递的消息的类型也是 `Map[VertexId, Int]`，并且我们想把这些消息合并起来并保留每个键对应的最小值，所以我们同样可以在 Pregel 运行的 `reduce` 阶段使用 `mergeMaps` 函数。

最后一步，通常也是最复杂的一步：我们需要编写代码来构建发送给每个顶点的消息，依据是每次迭代时每个顶点从邻接点收到的信息。这里的基本思想如下：每个顶点将当前的 `Map[VertexId, Int]` 中每个键对应的值加 1，然后用 `mergeMaps` 方法把加过 1 后的 `map` 值和从邻接点收到的值合并，如果 `mergeMaps` 方法的返回结果与邻接点内部的 `Map[VertexId, Int]` 不同，就将该结果发送给邻接点。这一系列操作的代码如下：

```
def checkIncrement(
    a: Map[VertexId, Int],
    b: Map[VertexId, Int],
    bid: VertexId) = {
  val aplus = a.map { case (v, d) => v -> (d + 1) }
  if (b != mergeMaps(aplus, b)) {
    Iterator((bid, aplus))
  } else {
    Iterator.empty
  }
}
```

实现好 `checkIncrement` 之后，我们来定义 `iterate` 函数。在每个 Pregel 迭代过程中，我们用这个函数来对 `EdgeTriplet` 内部的 `src` 和 `dst` 顶点执行消息更新，代码如下：

```
def iterate(e: EdgeTriplet[Map[VertexId, Int], _]) = {
  checkIncrement(e.srcAttr, e.dstAttr, e.dstId) ++
  checkIncrement(e.dstAttr, e.srcAttr, e.srcId)
}
```

每次迭代时，需要根据每个顶点已经知道的路径长度来确定需要传递给每个顶点的路径长度。接着我们需要返回一个迭代器，它包含一个 `(VertexId, Map[VertexId, Int])` 元组，其中第一个 `VertexId` 代表消息的目的顶点 ID，`Map[VertexId, Int]` 代表消息本身。

如果一次迭代中有任何顶点没有收到消息，`pregel` 运算符会认为该顶点的运算已经完成并将不再把它包括在后续处理中。一旦 `iterate` 方法没有消息发生给任何顶点，算法就结束。



相对于其他 BSP 系统实现（比如 Giraph），GraphX 的 `pregel` 运算符实现有一个限制：GraphX 中只有存在连接边的顶点之间才能发送消息，而 Giraph 可以在图中任何节点间发送消息。

现在完成了函数的编写，我们可以准备 BSP 运行所需的数据了。如果集群内存够多的话，我们可以用 GraphX 和 Pregel 式的算法计算任意两个顶点之间的路径长度。但是，对只想了解图中路径长度的总体分布而言，我们没必要这么做。其实我们只需要在顶点的一个随机样本子集上计算任意两个顶点之间的路径长度。使用 RDD 的 `sample` 方法可以对所有 `VertexId` 进行 2% 的不重复采样，随机数生成器的随机种子采用 `1729L`。

```
val fraction = 0.02
val replacement = false
val sample = interesting.vertices.map(v => v._1).
  sample(replacement, fraction, 1729L)
val ids = sample.collect().toSet
```

现在我们要建立一个新的 `Graph` 对象，如果一个顶点在样本子集中，`Graph` 对象的顶点 `Map[VertexId, Int]` 的值非空：

```
val mapGraph = interesting.mapVertices((id, _) => {
  if (ids.contains(id)) {
    Map(id -> 0)
  } else {
    Map[VertexId, Int]()
  }
})
```

最后，为了触发算法的运行，我们需要向顶点发送一个初始消息。对我们讨论的算法而言，这个初始消息是一个空的 `Map[VertexId, Int]`。接下来我们就可以调用 `pregel` 方法，`pregel` 方法后面是在每次迭代中要执行的 `update`、`iterate` 和 `mergeMaps` 方法。

```
val start = Map[VertexId, Int]()
val res = mapGraph.pregel(start)(update, iterate, mergeMaps)
```

上面的代码可能需要运行几分钟。算法的迭代次数是样本集中最长路径的长度加 1。但代码运行结束后，我们可以用 `flatMap` 方法得到顶点的 `(VertexId, VertexId, Int)` 元组，它就是刚才算出来的不同路径的长度：

```
val paths = res.vertices.flatMap { case (id, m) =>
  m.map { case (k, v) =>
    if (id < k) {
      (id, k, v)
    } else {
      (k, id, v)
    }
  }
}.distinct()
paths.cache()
```

我们现在可以计算非零路径长度的概要统计量和样本路径长度的直方图：

```
paths.map(_._3).filter(_ > 0).stats()
...
(count: 2701516, mean: 3.57,
 stdev: 0.84, max: 8.0, min: 1.0)

val hist = paths.map(_._3).countByValue()
hist.toSeq.sorted.foreach(println)
...
(0,248)
(1,5653)
(2,213584)
(3,1091273)
(4,1061114)
(5,298679)
(6,29655)
(7,1520)
(8,38)
```

样本的平均路径长度为 3.57，上一节我们计算出了聚类系数为 0.274。表 7-1 给出了三个不同的小世界网络的平均路径长度和聚类系数，同时还给出了对这三个网络进行随机采样（顶点数和边数相同）之后的图的相应概要统计量。这些数据来源于 Auber 等于 2003 年发表的论文“Multiscale visualization of small world networks”（http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1947385）。

表7-1：小世界网络举例

图	平均路径长度（APL）	聚类系数（CC）	随机APL	随机CC
IMDB	3.20	0.967	2.67	0.024
Mac OS 9	3.28	0.388	3.32	0.018
.edu 网站	4.06	0.156	4.048	0.001

IMDB 图是根据参演同一部电影的演员生成的，Mac OS 9 网络描述的是 Mac OS 9 操作系统中头文件被包含在相同源代码文件中的情况。第三行 .edu 网站是关于以顶级域名 .edu 结尾的网站相互链接的情况，引用源自 Adamic 1999 年的一篇论文（http://www.hpl.hp.com/research/idl/papers/smallworld/smallworldpaper.html）。我们的分析结果表明，MEDLINE 论文引用索引中的 MeSH 标签网络的平均路径长度和聚类系数值，与其他知名的小世界网络的对应统计量差不多。考虑到平均路径长度比较小，它们的聚类系数比我们预想的都要大。

7.9 小结

起初人们研究小世界网络只是出于好奇。现实世界的网络有如此多的种类，不管它们来自社会科学、政治学，还是来自神经科学和细胞生物学，都有非常相似而奇特的结构属性，这种现象非常有意思。最近的研究表明，当这些网络中的小世界结构出现异常时，就暗示着这个网络可能发生了功能性问题。杜克大学的 Jeffrey Petrella 博士收集了许多这方面的

研究（http://pubs.rsna.org/action/cookieAbsent），这些研究表明大脑神经元网络具有小世界结构，这种小世界结构异常的病人被诊断出患有阿尔兹海默症、精神分裂症、抑郁症或注意力缺陷障碍。通常现实世界中的图都应该具有小世界属性，如果没有显示这种属性则表示可能存在问题，比如公司之间交易或信托关系的小世界图中可能反映出欺诈活动。

第 8 章

纽约出租车轨迹的空间和时间数据分析

作者：Josh Wills

时间和空间最让我困惑；但也没什么不让我那么困惑，因为我从来不想别的。

——Charles Lamb

纽约的黄色出租车很有名，对许多到纽约旅游的人来讲，一边吃着街头小店买来的热狗，一边招呼黄色出租车已经成为旅游中不可或缺的一部分，就像大家一定要坐电梯上帝国大厦顶层一样。

纽约本地人对什么时候什么地方最容易打到车可谓各怀绝技，特别是高峰期或下雨天。但在每天下午 4 点到 5 点出租车换班的时段，估计像他们这样的高手也只能推荐你去坐地铁了。每天这个时候，黄色出租车需要回到调度中心（通常在皇后区）进行交班。如果交班晚了，司机可是要交罚款的。

2014 年 3 月，纽约市出租车和豪华轿车委员会在其 Twitter 账号 @nyctaxi（https://twitter.com/nyctaxi）上公布了出租车的信息图。这个信息图可以显示任意时刻在途出租车的数量和在途出租车被占用的百分比。很显然，在下午 4 点到 6 点，在途车数将大大减少，而且其中三分之二的车都被占用。

这条推文引起了城市规划专家 Chris Whong 的注意，Chris Whong 可是个数据迷，他立刻给 @nyctaxi 账号发了一条推文去了解信息图中所用的数据是否公开。委员会回复说只要提交一份 FOIL（Freedom of Information Law，信息自由法律）申请，并提供足够大的硬盘就

可以拿到他想要的数据。于是 Chris Whong 就填好 PDF 申请表，买了两块 500 GB 的硬盘并寄给委员会。两个工作日之后，Chris 就拿到了 2013 年 1 月 1 号到 12 月 31 号全年的所有出租车乘车数据。更令人高兴的是，Chris 甚至把所有运营数据也公布到了网上，这些数据成为很多漂亮的纽约交通信息图的依据。

出租车利用率，也就是出租车有乘客乘坐的时间与在途时间的比例，是理解出租车经济学的一个很重要的统计量。影响利用率的一个因素就是乘客的目的地：如果出租车乘客中午时分在联合广场附近下车，不出两分钟肯定又有乘客上车。但是乘客如果是凌晨两点在史坦顿岛下车，那这辆出租车就只能开回到曼哈顿才能接下一单生意。我们想对这种影响进行量化，并由此归结出租车平均等单时间与乘客下车点区域的函数关系，这些区域包括曼哈顿、布鲁克林、皇后、布朗克斯、史坦顿岛和其他区域（比如，乘客在纽约国际机场之类的市郊下车的情况）。

进行数据分析时我们往往要处理两类数据：时间数据（比如日期和时间）和空间数据（比如经纬度和边界）。本章我们将说明如何用 Scala 和 Spark 来处理这两类数据。

8.1 数据的获取

为了分析出租车平均等单时间与乘客下车点区域的函数关系，我们只需要 2013 年 1 月份以后的打车费用数据，这些数据解压之后大约有 2.5 GB，你可以从 http://www.andresmh.com/nyctaxitrips/ 下载 2013 年每个月的数据。如果你手头有一个足够大的 Spark 集群，也可以在全年的数据上重现接下来的分析。现在我们先在客户端机器上建立一个工作目录，然后看一下运营数据的结构，代码如下：

```
$ mkdir taxidata
$ cd taxidata
$ wget https://nyctaxitrips.blob.core.windows.net/data/trip_data_1.csv.zip
$ unzip trip_data_1.csv.zip
$ head -n 10 trip_data_1.csv
```

除了文件头，CSV 文件每行数据代表一次打车记录。每条打车记录包含如下信息：出租车（车牌号的哈希）、司机（出租车司机驾照号的哈希）、打车的开始时间和结束时间，以及乘客上车点和下车点的经纬度坐标。

8.2 基于Spark的时间和空间数据分析

Java 平台的一大特点就是多年来用这个语言开发了大量代码：对于你可能用到的任何数据结构和算法，很可能早就有人写好了一个用于解决这个问题的 Java 库，而且很可能有个开源的版本可以下载来用，根本不用付什么许可费。

当然，我们不能因为有这样一个免费的库存在就一定要使用它，开源项目的质量参差不

齐，bug 修复和新特性的进展状态也不一样，而且 API 设计和文档与教程的易用性也不相同。

我们选择工具的过程和开发人员为应用开发选择工具的过程不太一样。我们希望选择的工具便于交互式数据分析，并且易于分布式应用使用。具体来说，我们需要确保在 RDD 中要处理的主要数据类型支持 `Serializable` 接口，最好还能方便地用 Kryo 之类的库进行序列化。

除此之外，我们还希望用于交互式分析的库的外部依赖越少越好。虽然 Maven 和 SBT 之类的工具可以帮助应用开发人员在构建引用时处理复杂的依赖关系，但我们希望用一个 JAR 文件搞定所有代码，只要把这个 JAR 加载到 Spark shell 中就可以开始数据分析了。然而，在 Spark 中载入许多依赖库可能会导致它们与 Spark 自身所依赖的其他库之间的版本冲突，这种错误非常难调试，被开发人员称为 JAR *灾难*。

最后，我们希望工具的 API 相对简单而且功能丰富，不需要使用那些花哨的面向 Java 的设计模式，比如什么抽象工厂和访问者之类的模式。虽然这些模式对应用开发人员可能很有用，但它们往往在代码中引入与分析无关的复杂度。Scala 提供了对许多 Java 工具的封装，利用这些封装可以在使用 Scala 时减少设计模式所需的程式化代码，如果我们的工具也能这样那就更好了！

8.3 基于JodaTime和NScalaTime的时间数据处理

对于时间类型的数据，我们当然可以用 Java 的 `Date` 类和 `Calendar` 类。但用过这些类的人都知道它们很难用，即使是简单操作也要写一堆的程式化代码。很多年以来，JodaTime 都是 Java 程序员处理时间数据的首选。

Scala 有一个包装库叫作 NScalaTime，它提供了 JodaTime 的一些语法糖。只要一个简单的 `import` 语句就可以得到它所有的功能：

```
import com.github.nscala_time.time.Imports._
```

JodaTime 和 NScalaTime 的核心都是 `DateTime` 类。和 Java `String` 一样，`DateTime` 类的对象是不可变的（与之不同的是，Java API 中常用的 `Calendar/Date` 类对象是可变的），它有很多处理时间数据的方法。如下例所示，`dt1` 代表 2014 年 9 月 4 号上午 9 点，`dt2` 代表 2014 年 10 月 31 号下午 3 点：

```
val dt1 = new DateTime(2014, 9, 4, 9, 0)
dt1: org.joda.time.DateTime = 2014-09-04T09:00:00.000-07:00

dt1.dayOfYear.get
res60: Int= 247
```

```
val dt2 = new DateTime(2014, 10, 31, 15, 0)
dt2: org.joda.time.DateTime = 2014-10-31T15:00:00.000-07:00

dt1 < dt2
res61: Boolean = true

val dt3 = dt1 + 60.days
dt3: org.joda.time.DateTime = 2014-11-03T09:00:00.000-08:00

dt3 > dt2
res62: Boolean = true
```

为了进行数据分析，我们常常需要将字符形式的日期转换成 `DateTime` 对象进行计算。为此可以使用 Java 的 `SimpleDateFormat`，它可以用于解析不同格式的日期。下面我们将解析出租车数据集中的日期格式数据：

```
import java.text.SimpleDateFormat

val format = new SimpleDateFormat("yyyy-MM-dd HH:mm:ss")
val date = format.parse("2014-10-12 10:30:44")
val datetime= new DateTime(date)
```

完成了 `DateTime` 对象的解析之后，我们常常想在这些对象上进行一些时间运算，比如找出两个 `DateTime` 对象之间差多少秒、多少小时或多少天。在 JodaTime 中可以用 `Duration` 类来表示时间段的概念，可以用两个 `DateTime` 实例来创建 `Duration` 实例，代码如下：

```
val d = new Duration(dt1, dt2)
d.getMillis
d.getStandardHours
d.getStandardDays
```

计算时间段时要考虑大量关于不同时区和夏令时的让人心烦的细节，JodaTime 会帮我们搞定所有这些问题。

8.4 基于Esri Geometry API和Spray的地理空间数据处理

在 JVM 上进行时间数据处理比较简单：只要用 JodaTime 就好了，或者用其包装类 `NScalaTime` 以使分析代码更好理解。对地理空间数据，问题就没这么简单了。这是因为有非常多不同的工具和库，这些工具和库又有不同的功能、开发状态和成熟度，目前并没有一个主流的 Java 库对所有地理空间应用场景都适用。

首先要搞清楚的问题是我们的地理数据属于哪一种？地理数据主要分为矢量和光栅两种，不同的数据有不同的处理工具。在本章的场景中，我们有出租车乘客上车点和下车点的经纬度数据，以及表示纽约各个区边界的矢量数据，这些矢量数据用 GeoJSON 格式存储。

因此我们需要一个可以解析 GeoJSON 数据并能处理其空间关系的工具。具体来说，就是该工具可以判断某经纬度所代表的点是否在某个区边界所组成的多边形中。

不幸的是，目前没有一个开源的库正好能满足我们的要求。有一个 GeoJSON 的解析工具可以把 GeoJSON 转换成 Java 对象，但却没有相关的地理空间工具能对转换得到的对象进行空间关系分析。有一个名叫 GeoTools 的项目，但它的组件和依赖关系实在太多，我们不希望在 Spark shell 中选用有太多复杂依赖的工具。最后有一个 Java 版本的 Esri Geometry API，它的依赖很少而且可以分析空间关系，但它只能解析 GeoJSON 标准的一个子集，因此我们必须对下载的 GeoJSON 数据做一些预处理。

对数据分析师而言，没有工具就无法解决问题。但我们可是数据科学家啊！如果手头的工具解决不了问题，那我们就自己创建一个新工具。对本章要解决的问题而言，为了解析所有的 GeoJSON 数据，我们要加入新的 Scala 功能，其中包括 Scala Esri Geometry API 不能处理的功能。有许多 Scala 项目提供 JSON 数据解析功能，我们使用其中一个来实现这些功能。接下来几节中的代码可以在本书的 GitHub 资料库（http://github.com/jwills/geojson）上找到，这些 Scala 代码可以用于任何地理空间分析项目。

8.4.1　认识Esri Geometry API

Esri 库的核心数据类型是 `Geometry` 对象，一个 `Geometry` 代表一个形状和它所在的地理位置，Esri 提供了一组空间分析操作用于分析几何图像及其关系。

这些操作包括计算几何图形的面积、判断两个图形是否重叠和求两个图形相加所得到的几何图形。

对本章示例来讲，我们有表示出租车乘客下车地点（经度和纬度）的几何图形，也有表示纽约市行政区域范围的几何图形。我们想知道它们的包含关系：一个给定的位置点是否在曼哈顿区对应的多边形里边？

Esri API 有一个助手类 `GeometryEngine`，它提供了执行所有空间关系操作的静态方法，其中就包括 `contains` 操作。`contains` 方法有三个参数：两个 `Geometry` 实例参数和一个 `SpatialReference` 实例参数。`SpatialReference` 实例参数表示用于地理空间计算的坐标系统。为了提高精度，我们需要分析地球球体上的点映射到二维坐标系统后相对于坐标平面的空间关系。地理空间工程师有一套标准的通用标识符（well-known identifier，称为 WKID），是一套最常用的坐标系统。这里我们将采用 WKID 4326，它也是 GPS 所用的坐标系统。

作为 Scala 开发人员，我们总是想方设法减少在 Spark shell 中进行交互式数据分析时输入的代码量。在 Spark shell 中可不像 Eclipse 和 IntelliJ 那样能自动为我们补全长方法名，也不能像这些开发环境一样提供语法糖来辅助看懂某种操作。根据 NScalaTime 库（它定义

了包装类 RichDateTime 和 RichDuration）的命名规范，我们将定义自己的 RichGeometry 类，它扩展了 Esri Geometry 对象并提供一些有用的辅助方法，代码如下：

```
import com.esri.core.geometry.Geometry
import com.esri.core.geometry.GeometryEngine
import com.esri.core.geometry.SpatialReference

class RichGeometry(val geometry: Geometry,
    val spatialReference: SpatialReference =
      SpatialReference.create(4326)) {
  def area2D() = geometry.calculateArea2D()

  def contains(other: Geometry): Boolean = {
    GeometryEngine.contains(geometry, other, spatialReference)
  }

  def distance(other: Geometry): Double =
    GeometryEngine.distance(geometry, other, spatialReference
  }
}
```

我们将为 Geometry 定义一个伴生对象，它可以将 Geometry 类实例隐式转换为 RichGeometry 类型：

```
object RichGeometry{
  implicit def wrapRichGeo(g: Geometry) = {
    new RichGeometry(g)
  }
}
```

记住，要想这种转换起作用，需要在 Scala 环境中导入这个隐式函数定义，代码如下：

```
import RichGeometry._
```

8.4.2 GeoJSON简介

表示纽约市行政区域范围的数据是 GeoJSON 格式的，GeoJSON 中核心的对象称为*特征*，特征由一个 geometry 实例和一组称为*属性*（property）的键 – 值对组成。其中 geometry 可以是点、线或多边形。一组特征称为 FeatureCollection。现在我们把纽约市行政区地图的 GeoJSON 数据下载下来，然后看看它的结构。

将数据下载到客户端机器上的 taxidata 目录，并将文件名改短：

```
$ wget https://nycdatastables.s3.amazonaws.com/2013-08-19T18:15:35.172Z/
  nyc-borough-boundaries-polygon.geojson
$ mv nyc-borough-boundaries-polygon.geojsonnyc-boroughs.geojson
```

打开文件然后观察一下特征记录，注意属性和几何图形对象。对本章示例而言，也就是表示行政区域范围的多边形和保护行政区域名称及其他相关信息的属性。

可以用 Esri Geometry API 解析每个特征内部的几何 JSON，但这个 API 不能帮我们解析 id 或 properties 字段，properties 字段可能是任何 JSON 对象。为了解析这些对象，要用到 Scala 的 JSON 库，这样的库有很多。

这里正好可以用 Spray，它是一个用 Scala 构建 Web 服务的开源工具包。通过隐式调用 spray-json 的 toJson 方法，可以将任何 Scala 对象转换成相应的 JsValue。也可以通过调用它的 parseJson 方法将任何 JSON 格式的字符串转换成一个中间类型，然后在中间类型上调用 convertTo[T] 将其转换成一个 Scala 类型 T。Spray 内置了对常用 Scala 原子类型、元组和集合类型的转换实现，同时也提供了一个格式化工具，该工具可以定义自定义类型（比如 RichGeometry）与 JSON 之间相互转换的规则。

首先为表示 GeoJSON 的特征将建立一个 case 类。根据规范，特征是一个 JSON 对象，它必须有一个 geometry 字段和一个 properties 字段。geometry 代表 GeoJSON 的几何类型，properties 则是一个 JSON 对象，可以包含任意个数和类型的键 – 值对。特征也可以有一个可选字段 id，表示任何 JSON 标识符。我们的 case 类的 Feature 将为每个 JSON 字段定义相应的 Scala 字段，同时它还提供了在属性 map 中查找值的辅助方法：

```
import spray.json.JsValue

case class Feature(
    val id: Option[JsValue],
    val properties: Map[String, JsValue],
    val geometry: RichGeometry) {
  def apply(property: String) = properties(property)
  def get(property: String) = properties.get(property)
}
```

我们使用 RichGeometry 类实例来表示 Feature 中的 geometry 字段。我们通过 Esri Geometry API 的 GeoJSON 图形解析函数创建 RichGeometry 类实例。

还需要为 GeoJson FeatureCollection 定义一个 case 类。为了使 FeatureCollection 类更易于使用，实现 apply 和 length 这两个抽象方法，就能让它扩展 IndexedSeq[Feature] 这个 trait。这样就能直接在 FeatureCollection 实例上调用标准的 Scala Collections API 的方法，比如 map、filter 和 sortBy 等，而不用访问底层的 Array[Feature]。

```
case class FeatureCollection(features: Array[Feature])
    extends IndexedSeq[Feature] {
  def apply(index: Int) = features(index)
  def length = features.length
}
```

在定义表示 GeoJSON 数据的 case 类之后，还需要定义领域对象（RichGeometry、Feature 和 FeatureCollection）与相应的 JsValue 实例之间相互转换的格式。为此要创建 Scala 的单例对象，这些对象扩展了 RootJsonFormat[T] trait，这个 trait 定义了抽象方法 read(jsv:

JsValue): T 和 write(t: T): JsValue。对于 RichGeometry 类，我们可以将大部分的解析和格式化逻辑委派给 Esri Geometry API，也就是 GeometryEngine 类的 geometryToGeoJson 和 geometryFromGeoJson 方法。但对我们定义的 case 类，我们需要自己编写格式化逻辑。下面是 Feature 这个 case 类的格式化代码，其中包含了一些为处理可选字段 id 的特殊逻辑：

```
implicit object FeatureJsonFormat extends
    RootJsonFormat[Feature] {
  def write(f: Feature) = {
    val buf = scala.collection.mutable.ArrayBuffer(
      "type" -> JsString("Feature"),
      "properties" -> JsObject(f.properties),
      "geometry" -> f.geometry.toJson)
    f.id.foreach(v => { buf += "id" -> v})
    JsObject(buf.toMap)
  }

  def read(value: JsValue) = {
    val jso = value.asJsObject
    val id = jso.fields.get("id")
    val properties = jso.fields("properties").asJsObject.fields
    val geometry = jso.fields("geometry").convertTo[RichGeometry]
    Feature(id, properties, geometry)
  }
}
```

FeatureJsonFormat 对象中的 implicit 关键字是为了 Spray 库可以在 JsValue 实例上调用 convertTo[Feature] 时进行查找。可以在 GitHub 上找到 GeoJSON 库实现 RootJsonFormat 的其余源代码。

8.5 纽约市出租车客运数据的预处理

现在我们手头上有了 GeoJSON 和 JodaTime 库，该开始用 Spark 对纽约市出租车客运数据进行交互式分析了！先在 HDFS 上建立一个 taxidata 目录，并将载客数据复制到集群上：

```
$ hadoop fs -mkdir taxidata
$ hadoop fs -put trip_data_1.csv taxidata/
```

现在启动 Spark shell，使用 --jars 参数将要用到的库导入 REPL 中：

```
$ mvn package
$ spark-shell --jars target/ch08-geotime-1.0.0.jar
```

Spark shell 加载完成后，就可以像在其他章中一样，用出租车数据创建一个 RDD 并且检查一下前几行的数据：

```
val taxiRaw = sc.textFile("taxidata")
val taxiHead = taxiRaw.take(10)
taxiHead.foreach(println)
```

我们来定义一个 case 类，它包含了分析时我们要用到的每条打车记录信息。类名叫 Trip，它用 JodaTime API 中的 DateTime 表示上下车时间，用 Esri Geometry API 中的 Point 表示上下车地点的经纬度。

```
import com.esri.core.geometry.Point
import com.github.nscala_time.time.Imports._

case class Trip(
  pickupTime: DateTime,
  dropoffTime: DateTime,
  pickupLoc: Point,
  dropoffLoc: Point)
```

为了从 taxiRaw RDD 中把数据解析为我们定义好的 case 类，需要定义一些辅助对象和辅助方法。首先，我们用 SimpleDateFormat 来处理上下车时间，并设置合适的时间格式字符串参数：

```
val formatter = new SimpleDateFormat(
  "yyyy-MM-dd HH:mm:ss")
```

接着通过 Point 和 Scala 为字符串提供的隐式 toDouble 方法来解析上下车地点的经纬度：

```
def point(longitude: String, latitude: String): Point = {
  new Point(longitude.toDouble, latitude.toDouble)
}
```

定义完这些方法后，再来定义一个 parse 函数，用于从 taxiraw RDD 的每一行解析出包含出租车司机驾照和 Trip 实例的一个二元组。

```
def parse(line: String): (String, Trip) = {
  val fields = line.split(',')
  val license = fields(1)
  val pickupTime = new DateTime(formatter.parse(fields(5)))
  val dropoffTime = new DateTime(formatter.parse(fields(6)))
  val pickupLoc = point(fields(10), fields(11))
  val dropoffLoc = point(fields(12), fields(13))

  val trip = Trip(pickupTime, dropoffTime, pickupLoc, dropoffLoc)
  (license, trip)
 }
```

可以用 taxiHead 数组得到几条记录，并在这几条记录上测试 parse 函数，以此来验证它是否能正确处理样本数据。

8.5.1　大规模数据中的非法记录处理

实际处理过大规模数据集的人都知道，这些数据集中总有几条记录的格式不满足代码的要求。许多 MapReduce 作业和 Spark 处理管道会因为无法正常解析非法记录而抛出异常，致使运行失败。

我们可以逐个排除这些异常，先检查任务日志，然后分析抛出异常的每行代码，再修改代码以忽略或修正非法记录。这个过程相当漫长乏味，而且常常像是在玩打鼹鼠游戏：刚解决好一个异常，分区中后面的某条记录上又冒出了另一个异常。

有经验的数据科学家在处理新数据集时常用的一个策略就是在解析代码中增加一个 try-catch 块，这样任何非法记录就都可以写入到日志中而不会导致整个作业失败。如果整个数据集中只有几条非法记录，忽略掉这些记录并继续分析应该没问题。有了 Spark，我们甚至可以做得更好：通过调整解析代码，可以对数据中的非法记录进行交互式分析，就和其他分析一样轻松。

对 RDD 中的每条记录，解析代码的结果可能有两个：要么成功解析并返回一条有意义的结果，要么失败并抛出异常。抛出异常时我们希望得到非法记录本身和所抛出的异常。当操作结果有两种互斥的结果时，可以使用 Scala 的 Either[L, R] 类型来表示操作的返回类型。对我们本章的问题来说，L（left）结果代表成功解析得到的记录，而 R（right）结果是一个由异常和引起异常的记录组成的二元组。

safe 函数接受一个输入类型为 S => T 的参数 f 并且返回一个新的 S => Either[T, (S, Exception)] 类型，它会返回调用 f 的结果，或者在抛出异常时返回包含非法输入值和异常本身组成的元组：

```
def safe[S, T](f: S => T): S => Either[T, (S, Exception)] = {
  new Function[S, Either[T, (S, Exception)]] with Serializable {
    def apply(s: S): Either[T, (S, Exception)] = {
      try {
        Left(f(s))
      } catch {
        case e: Exception => Right((s, e))
      }
    }
  }
}
```

现在可以通过向 safe 函数传入 parse 函数（类型为 String => Trip）来得到一个更加安全的包装函数 safeParse，然后在 taxiRaw RDD 上调用 safeParse：

```
val safeParse = safe(parse)
val taxiParsed = taxiRaw.map(safeParse)
taxiParsed.cache()
```

如果想要知道输入行中成功解析的记录数量，可以用 Either[L, R] 的 isLeft 方法并结合使用 countByValue 这个动作：

```
taxiParsed.map(_.isLeft).
countByValue().
foreach(println)
...
```

```
(false,87)
(true,14776529)
```

情况看起来很不错，输入记录中只有很小一部分抛出异常。我们想在客户端检查一下那些抛出的异常，并且搞清楚改进解析代码能否正确处理这些异常。一种获取非法记录的方法就是联合使用 filter 和 map 方法，代码如下：

```
val taxiBad = taxiParsed.
  filter(_.isRight).
  map(_.right.get)
```

另一种方法是在一个调用中完成 filter 和 map，做法是在 RDD 类上使用 collect 方法，用一个偏函数（partial function）作为参数。偏函数包含一个 isDefinedAt 方法，用于确定函数对某个输入是否有定义。可以通过扩展 PartialFunction[S, T] trait 来定义偏函数，也可以按照下面的特殊 case 语法来定义偏函数：

```
val taxiBad = taxiParsed.collect({
  case t if t.isRight => t.right.get
})
```

if 块决定偏函数有定义的值，=> 之后的表达式给出偏函数的返回值。请读者注意区分在 RDD 上应用偏函数的 collection 转换和 collect() 动作，后者没有输入参数并且向客户端返回 RDD 的内容：

```
taxiBad.collect().foreach(println)
```

注意，大多数非法记录都抛出 ArrayIndexOutOfBoundsExceptions 异常，原因就是在执行前面的 parse 函数时缺少我们要提取的部分字段。因为非法记录数相对较少（大约只有 87 条），所以我们就不用考虑这些记录。让我们把精力放在那些正确解析的记录上，直接继续下一步分析。

```
val taxiGood = taxiParsed.collect({
  case t if t.isLeft => t.left.get
})
taxiGood.cache()
```

即使 taxiGood RDD 中的记录解析正确，它们也还可能存在数据质量问题，这些问题有待我们进一步发现和处理。为了找出这些遗留的数据质量问题，我们要思考每条正确的乘车记录都应该满足的期望条件。

考虑到乘车数据的时间特性，任何乘车记录的下车时间都比上车时间晚是一个合理的规则。同样我们可以期望乘车时间不超过几个小时，虽然确实有可能存在这样耗时较长的乘车记录，比如高峰期打车或遇到事故延误的情况时打车要几个小时是可能的。将“合理”的打车时间的阈值设为多少合适，我们对此不是很确定。

我们来定义一个辅助方法 `hours`，它使用 JodaTime 的 `Duration` 类来计算一次打车的乘坐时间。我们可以用它来计算 `taxiGood` RDD 中打车记录上下车时间的小时数直方图：

```
import org.joda.time.Duration

def hours(trip: Trip): Long = {
  val d = new Duration(
    trip.pickupTime,
    trip.dropoffTime)
  d.getStandardHours
}

taxiGood.values.map(hours).
  countByValue().
  toList.
  sorted.
  foreach(println)
...
(-8,1)
(0,14752245)
(1,22933)
(2,842)
(3,197)
(4,86)
(5,55)
(6,42)
(7,33)
(8,17)
(9,9)
...
```

现在看起来都不错，只有一条打车记录除外，它的乘车时间为 –8 小时！难道是电影《回到未来》中德洛雷安在用纽约出租挣外快？让我们来一探究竟：

```
taxiGood.values.
  filter(trip => hours(trip) == -8).
  collect().
  foreach(println)
```

这给出了那条奇怪的记录，打车开始于 1 月 25 日下午 6 点而在同一天上午 10 点前结束。我们看不出来这条打车记录到底哪里出了错。但是由于看起来只有一条记录是这种情况，直接将它从记录中去掉应该没问题。

现在观察剩余的那些小时数大于零的记录，绝大多数出租车乘坐记录看起来不超过 3 个小时。我们将对 `taxiGood` RDD 进行过滤，只需要关心“典型”的乘坐记录的分布而暂时忽略那些异常情况：

```
val taxiClean = taxiGood.filter{
  case (lic, trip) => {
    val hrs = hours(trip)
```

```
    0 <= hrs && hrs < 3
  }
}
```

8.5.2 地理空间分析

现在我们从地理空间角度来检查出租车数据。对每次乘车记录，我们各用一对经纬度来表示乘客的上车地点和下车地点。我们想确定这两对经纬度分别属于哪个行政区，并且要找出那些起点不在纽约五个行政区之内的记录。比如，如果是从曼哈顿打车到纽约国际机场，这条记录应该是合法的，虽然它的终点并不在五个行政区之内。但如果打车的终点是南极，我们就有理由相信记录是非法的并且应该将其排除在分析之外。

为了分析行政区，需要将前面下载的 GeoJSON 数据加载并存储在 nyc-boroughs.geojson 文件中。`scala.io` 包中的 `Source` 类可以帮助我们轻松把文本文件或 URL 中的数据作为一个 `String` 读取到客户端中：

```
val geojson = scala.io.Source.
  fromFile("nyc-boroughs.geojson").
  mkString
```

现在需要用到本章前面讨论过的 GeoJSON 解析工具，通过在 Spark shell 中使用 Spray 和 Esri，就可以将 `geojson` 解析为 `FeatureCollection` `case` 类：

```
import com.cloudera.science.geojson._
import GeoJsonProtocol._
import spray.json._

val features = geojson.parseJson.convertTo[FeatureCollection]
```

我们建立一个简单的地点来测试 Esri Geometry API 的功能并验证该 API 能正确找出该地点所属行政区：

```
val p = new Point(-73.994499, 40.75066)
val borough = features.find(f => f.geometry.contains(p))
```

在使用出租车乘车数据上的 `features` 之前，要思考一下怎样组织地理空间数据最有效。一个方法是研究专门为地理空间查询而优化的数据结构，比如四叉树，然后编写自己的实现代码。但我们先看一下是否能想出一个快速的启发式算法以省掉这部分工作。

`find` 方法将遍历 `FeatureCollection` 直到找到一个图形包含给定经纬度 `Point` 的特征为止。大部分打车记录的上车点和下车点都在曼哈顿地区，因此如果代表曼哈顿的地理空间特征在集合中早点出现，大部分的 `find` 方法调用将可以较快地返回。我们可以把每个特征的 `boroughCode` 属性作为排序的键，1 代表曼哈顿，5 代表史坦顿岛。对每个行政区特征内部，我们希望最大的多边形相关的特征排在较小的多边形之前，因为打车时大部分起点或

终点会落在每个行政区中“较大”的地区。然后根据新政区代码和每个特征的几何图形的 area2D() 大小来对特征进行排序应该是个不错的策略：

```
val areaSortedFeatures = features.sortBy(f => {
  val borough = f("boroughCode").convertTo[Int]
  (borough, -f.geometry.area2D())
})
```

注意这里是根据 area2D() 取负值之后排序的，因为我们想让最大的多边形排在最前面而 Scala 默认是从小到大排序。

现在可以将 frs 序列中排好序的特征广播到集群上，然后写一个函数利用这些特征来判断下车点落在五个行政区的哪一个中。

```
val bFeatures = sc.broadcast(areaSortedFeatures)

def borough(trip: Trip): Option[String] = {
  val feature: Option[Feature] = bFeatures.value.find(f => {
    f.geometry.contains(trip.dropoffLoc)
  })
  feature.map(f => {
    f("borough").convertTo[String]
  })
}
```

如果没有哪个特征包含打车的 dropoff_loc，optf 的值将为 None，在 None 上调用 map 的结果还是 None。我们可以在 taxiClean RDD 中的打车记录上应用该函数从而创建一个按行政区统计的直方图。

```
taxiClean.values.
  map(borough).
  countByValue().
  foreach(println)
...
(Some(Queens),672135)
(Some(Manhattan),12978954)
(Some(Bronx),67421)
(Some(Staten Island),3338)
(Some(Brooklyn),715235)
(None,338937)
```

像我们预期的那样，绝大多数打车记录的终点在曼哈顿地区，在史坦顿岛的相对较少。终点落在五个行政区之外的乘车记录数有点让人吃惊，而 None 记录的数量比终点在布朗克斯区的记录数要多得多。现在我们从数据中取出几条这种记录：

```
taxiClean.values.
  filter(t => borough(t).isEmpty).
  take(10).foreach(println)
```

打印出这些记录，会发现它们大部分的起点和终点都落在点（0.0，0.0）上，表明这些记录的起点和终点数据缺失。由于这些数据对我们的分析帮助不大，应该把这种例外情况过滤掉：

```
def hasZero(trip: Trip): Boolean = {
  val zero = new Point(0.0, 0.0)
  (zero.equals(trip.pickupLoc) || zero.equals(trip.dropoffLoc))
}

val taxiDone = taxiClean.filter{
  case (lic, trip) => !hasZero(trip)
}.cache()
```

现在重新在 taxiDone RDD 上运行分析，得到如下结果：

```
taxiDone.values.
  map(borough).
  countByValue().
  foreach(println)
...
(Some(Queens),670996)
(Some(Manhattan),12973001)
(Some(Bronx),67333)
(Some(Staten Island),3333)
(Some(Brooklyn),714775)
(None,65353)
```

过滤掉起点或终点为零的记录后，五个行政区的输出记录只是减少了一些，但 None 对应的记录大部分被去掉了，剩下的那些终点落在郊区的记录条数现在看起来比较合理了。

8.6 基于Spark的会话分析

前面提到的一个目标是要研究出租车乘客下车区域与出租车等待下一单生意的等待时间之间的关系。现在 taxiDone RDD 包含了每个出租车司机的所有载客数据，但这些记录分布在不同的分区中。要计算一次载客结束到下次载客开始的时间间隔，需要把一个班次中的所有载客记录按一个司机一条记录进行汇总，然后把该班次中的载客记录按时间排序。排序让我们可以比较一次载客记录的下车时间和下一次载客的上车时间。这种对单个实体在不同时间的一系列事件的分析称为*会话分析*（sessionization），它经常用于对 Web 日志做网站用户行为分析。

会话分析是发掘数据价值和开发数据产品的一种非常强大的技术，可以帮助人们更好地进行决策。比如 Google 的自动拼写纠正引擎就是基于用户活动会话构建的。Google 将每天 Google 网站上发生的每个事件（搜索、点击、地图访问等）用日志记录下来，并在这些记录上构建会话。为了找出可能的拼写纠正项，Google 对这些会话进行处理并找出如下描述的情形：用户输入查询却没有做任何点击，几秒钟以后该用户又输入一个稍微不同

的查询，然后点击查询结果，然后就离开 Google 了。找到上述情形之后，Google 计算每两个这样的查询的模式出现的次数，如果次数足够频繁（比如如果我们发现每次输入查询“untied stats”几秒后输入查询“united states”），那么就可以假设第二个查询是第一个查询的拼写纠正项。

这个分析利用日志中展现出的人类行为模式来构建拼写纠正引擎，这个引擎比任何基于字典的引擎都要强大得多。该引擎可以用于任何语言的拼写检查，并且可以用于纠正那些没有在任何字典中出现的词（比如某个创业公司的名字），甚至可以用于纠正类似“untied stats”这样两个单词拼写错误的查询。Google 给出推荐搜索项和相关搜索项时也使用了类似的技术，Google 还将这个技术用于确定哪些查询应该返回一个 OneBox 结果，对 OneBox 类型的搜索结果，结果直接显示在查询页面上，这样用户就不需要继续点击进入不同页面。OneBox 已经应用到 Google 天气、体育赛事得分、地址和许多其他类型的查询中。

现在每个实体发生的所有事件是散布在 RDD 的各个分区中的，因此我们需要按时间顺序将相关时间放在一起。下一节将演示如何使用 Spark 1.2 中引入的高级分析功能来高效地构造和分析会话。

构建会话：基于Spark的二级排序

在 Spark 中创建会话，最简单的方法就是根据标识符做 `groupBy`，然后根据时间戳标识符对打乱次序后的事件数据排序。如果每个实体只有少数事件，这种方法还是比较行得通的。然而，这个方法的扩展能力十分有限，因为它需要将每个实体的所有事件同时都放入内存，因此随着每个实体的事件数量越来越大，所占用的内存将会越来越大。我们需要一种构建会话的方法，它不需要在排序时将一个实体的所有事件同时放入内存。

在 MapReduce 中，可以通过*二级排序*（secondary sort）来构建会话，做法是创建一个由标识符和时间戳组成的组合键，根据该组合键对所有记录排序，然后用一个定制的分区器（partitioner）和分组函数保证相同标识符对应的所有记录都在同一个结果分区中。幸运的是，Spark 也支持这种排序模式，为此我们可以使用 Spark 的 `repartitionAndSortWithinPartitions` 转换。

在 GitHub 上的资料库中，我们提供了一个可以完成这项工作的 `groupByKeyAndSortValues` 转换的实现。由于该功能大部分和本章要讨论的概念没关系，所以这里就不讨论其细节了。目前 Spark JIRA SPARK-3655 正在向 Spark 核心中加入类似的转换功能。

转换需要四个参数：

- 要操作的键 – 值对的 RDD；
- 从一个输入值中提取二级排序键的函数；

- 可选的拆分函数，将相同键对应的数据拆分成多个组（对应本章我们讨论的情况则是将相同司机的载客记录分成多个班次）；
- 输出 RDD 中的分区个数。

这里我们的二级排序键为上车时间：

```
def secondaryKeyFunc(trip: Trip) = trip.pickupTime.getMillis
```

我们需要确定一个标准来判定某个班次的结束时间和新班次的开始时间。和本章中其他选择（比如将超过三小时的乘车记录去掉）一样，选择标准有些主观成分，并且我们需要明白这种选择可能影响后续分析的结果。尝试不同的拆分标准并观察这些标准对结果的影响是个不错的做法，特别是在会话分析的早期阶段。确定了合理的、分割两个班次的时间窗口标准后，就要坚持这个标准。这里重要的是要做出选择，虽然有些主观。作为数据科学家，我们主要关注事物随时间的变化，只有保持数据和指标的定义不变，才能对较长时间内的数据进行有效的比较。

我们先来试试用四小时作为换班标准，这时如果连续载客时间累计超过四小时，则认为后续载客属于新班次。两个班次中间的间隙时间可以看成是司机换班时的休息时间，该时间段不载客。

```
def split(t1: Trip, t2: Trip): Boolean = {
  val p1 = t1.pickupTime
  val p2 = t2.pickupTime
  val d = new Duration(p1, p2)
  d.getStandardHours >= 4
}
```

有了二级排序键和班次拆分函数，我们就可以进行分组和排序了。由于这个操作会触发乱序和较大规模的计算，并且我们将多次使用计算结果，所以有必要将结果缓存起来：

```
val sessions = groupByKeyAndSortValues(
  taxiDone, secondaryKeyFunc, split, 30)
sessions.cache()
```

结果是 `RDD[(String, List[Trip])]`，这里所有载客记录都属于同一个司机的同一班次，并且这些载客记录是按时间排序的。

执行会话分析管道是一个代价很高的操作，并且对数据建立会话之后的结果往往对我们可能要执行的多种不同分析都非常有用。如果这份数据在后续的分析中还要继续使用，或者其他数据科学家也要用到这份数据，那么可以对大规模数据进行一次性的会话分析处理，然后把结果写入到 HDFS 上，以便用于回答一些不同的问题。这样一次性会话分析的昂贵代价就可以分摊到多个分析问题，也不失为一种不错的策略。统一的会话分析也有利于在整个数据科学小组范围内实施统一的会话定义标准，使用统一的会话标准则有助于对结果进行对等比较。

现在我们已经准备就绪，可以开始对会话数据进行分析从而得出某个区域出租车司机在卸客之后等待下一位乘车上车的平均接单等待时间了。我们将定义一个 boroughDuration 方法，它接受两个 Trip 实例作为参数，计算出第一个 Trip 的区域，以及第一个 Trip 的下车时间和第二个 Trip 的上车时间的 Duration，代码如下：

```
def boroughDuration(t1: Trip, t2: Trip) = {
  val b = borough(t1)
  val d = new Duration(
    t1.dropoffTime,
    t2.pickupTime)
  (b, d)
}
```

我们要将这个新函数应用在所有会话 RDD 中连续两个载客记录上。虽然这里我们可以自己写一个 for 循环，但也可以用 Scala Collections API 提供的 sliding 这一较为函数式的方法：

```
val boroughDurations: RDD[(Option[String], Duration)] =
  sessions.values.flatMap(trips => {
    val iter: Iterator[Seq[Trip]] = trips.sliding(2)
    val viter = iter.filter(_.size == 2)
    viter.map(p => boroughDuration(p(0), p(1)))
  }).cache()
```

在 sliding 方法的结果上调用 filter 保证忽略掉只有一次载客记录的会话。在会话之上进行 flatMap 操作的结果是一个 RDD[(Option[String], Duration)]，我们现在可以检查一下它的内容。首先应该验证大部分的等单时间应该是非负的：

```
bdrdd.values.map(_.getStandardHours).
  countByValue().
  toList.
  sorted.
  foreach(println)
...
(-2,2)
(-1,17)
(0,13367875)
(1,347479)
(2,76147)
(3,19511)
```

只有少数几条记录的等单时间为负，我们进一步仔细检查这些记录，也没发现产生这些错误数据的规律。在分析等单时间分布时可以不考虑这些记录。可以用 Spark 的 StatCounter 类帮我们计算等单时间的分布，StatCounter 类我们之前用过，代码如下：

```
import org.apache.spark.util.StatCounter

boroughDurations.filter{
  case (b, d) => d.getMillis >= 0
```

```
}.mapValues(d => {
  val s = new StatCounter()
  s.merge(d.getStandardSeconds)
}).
reduceByKey((a, b) => a.merge(b)).collect().foreach(println)
...

(Some(Bronx),(count: 56951, mean: 1945.79,
  stdev: 1617.69, max: 14116, min: 0))
(None,(count: 57685, mean: 1922.10,
  stdev: 1903.77, max: 14280, min: 0))
(Some(Queens),(count: 557826, mean: 2338.25,
  stdev: 2120.98, max: 14378.000000, min: 0))
(Some(Manhattan),(count: 12505455, mean: 622.58,
  stdev: 1022.34, max: 14310, min: 0))
(Some(Brooklyn),(count: 626231, mean: 1348.675465,
  stdev: 1565.119331, max: 14355, min: 0))
(Some(Staten Island),(count: 2612, mean: 2612.24,
  stdev: 2186.29, max: 13740, min: 0.000000))
```

数据显示曼哈顿地区的等单时间最短，只有 10 分钟多一点儿，这在我们的意料之中。布鲁克林地区的等单时间超过曼哈顿地区的两倍，乘客下车点在史丹顿岛地区的次数相对较少，司机的平均等单时间约为 45 分钟。

正如数据所示，根据乘客目的地的不同歧视性地对待乘客对出租车司机有很大的经济利益激励：如果乘客在史丹顿岛下车，司机就要空闲很长一段时间。纽约市出租车与豪华车协会多年来花了很大精力来整治这种歧视性的做法，由于乘客目的地的原因而拒载的行为一经发现就要面临罚款。对乘客目的地很近的打车数据进行分析应该是比较有意思的，如果乘客的目的地很近，司机和乘客可能会发生摩擦。

8.7 小结

设想一下，我们可以把本章所用到的技术用于开发一个应用，这个应用可以根据当前的交通模式和数据中最佳候客地点的历史记录来向出租车司机建议最佳的候客地点。还可以从乘客的角度进行分析：给定当前时间、地点和天气信息，我站在街头在五分钟之内招呼到出租车的概率有多大？这类信息可以加入 Google Maps 这类应用中，以帮助旅客确定何时出发及采用何种交通工具。

利用 Esri API 工具，可以对来自 JVM 系语言的地理空间数据进行交互式分析。这样的工具有好几个，Esri API 是其中之一，另一个是 GeoTrellis。GeoTrellis 是一个用 Scala 写的地理空间分析工具，它的设计目标之一就是易于在 Spark 中使用。第三个是基于 Java 的 GIS 工具 GeoTools。

第 9 章

基于蒙特卡罗模拟的金融风险评估

作者：Sandy Ryza

如果你想了解地质学，就研究地震。如果你想了解经济学，就研究经济萧条。

——Ben Bernanke

风险价值（Value at Risk，VaR）是一个金融统计概念，它度量在一定条件下的期望损失大小。自 1987 年美国股灾之后，VaR 迅速流行并被金融服务机构广泛使用，在金融服务机构的管理中发挥了举足轻重的作用，比如可以用它计算金融机构申请对应的信用等级所需要持有的现金量。除此之外，VaR 还可用于帮助人们更好地理解大量投资组合的风险特征，也可用于在交易执行之前提供快速决策依据。

评估 VaR 的方法极为复杂，其中许多涉及随机条件下的市场模拟，这需要进行大量计算。这些方法背后采用了一种称为蒙特卡罗模拟（Monte Carlo simulation）的技术。蒙特卡罗模拟中给出数千个甚至数百万个随机的市场状况，并观察这些状况对投资组合的影响。由于 Spark 本身具有高并行性，它非常适合进行蒙特卡罗模拟。Spark 可以利用数千个 CPU 核来运行随机试验并汇总结果。作为通用数据转换引擎，Spark 也擅长执行模拟前后的预处理和后处理任务。我们可以用它把原始的金融数据转换成执行模拟所需的模型参数，同样可以用它对模拟结果进行即席分析（ad-hoc analysis）。相对于传统的 HPC 环境而言，Spark 简单的编程模型使研发周期大大缩短。

现在我们给出“期望损失”的规范定义。VaR 是对投资风险的一个简单度量，它合理地估

计了一个投资组合在未来一段时间内的最大可能损失。统计量 VaR 由三个参数来确定：投资组合、时间跨度、置信水平。若在 95% 的置信水平下，某投资组合未来两周的 VaR 值为一百万美元，则表示该投资组合在两周后损失超过一百万美元的概率为 5%。

本章还会介绍另一个相关的统计量，我们称之为*条件风险价值*（Conditional Value at Risk，CVaR），有时也叫作*期望损失*（Expected Shortfall）。CVaR 不久前由巴塞尔银行业监管委员会提出，它是一个比 VaR 更好的风险度量指标。统计量 CVaR 的三个参数和 VaR 相同，但 CVaR 表示的是期望损失而不是截止值（cutoff value）。在置信水平为 95% 时，某投资组合未来两周的 CVaR 值为五百万美元，则表示该投资组合在最坏的 5% 情况下平均损失为五百万美元。

为了对 VaR 进行建模，我们先介绍一些新的概念、方法以及工具包。具体来说，我们将介绍核密度估计、如何用 breeze-viz 工具包进行绘图、多元正态分布（multivariate normal distribution）采样和 Apache Commons Math 工具包的统计函数。

9.1 术语

本章将涉及几个金融领域的术语，现在我们给出它们的简单定义。

- *金融工具*

  可交易的资产，比如债券、贷款、期权或股票。金融工具在任意时刻都可以用一个值来表示，也就是资产的卖出价。

- *投资组合*

  金融机构持有的金融工具的组合。

- *回报*

  一段时间内金融工具或投资组合的价值变化。

- *损失*

  负的回报。

- *指数*

  一个假设的金融工具组合。比如纳斯达克综合指数包含了美国和世界上其他国家主要公司的约 3000 支股票和金融工具。

- *市场因素*

  给定时间点的宏观金融环境指标，比如美国的国内生产总值（GDP）指标就是一个市场因素，又如美元对欧元的汇率也是一个市场因素。我们也常把市场因素简称为*因素*。

9.2 VaR计算方法

目前为止，我们对 VaR 的定义都比较宽泛。估计该统计量需要对投资组合的工作原理及其回报的概率分布进行建模。金融机构采用了许多不同的方法计算 VaR，然而这些计算方法都是来源于几种通用的方法。

9.2.1 方差-协方差法

方差 – 协方差（Variance-Covariance）是最简单的方法，其计算复杂度也最小。该模型假设每个金融工具的回报服从正态分布，这样就能估算出 VaR 值。

9.2.2 历史模拟法

历史模拟法（Historical Simulation）直接使用历史数据的分布推断风险值，而不依赖概要统计量。比如，为确定一个投资组合在置信水平为 95% 时的 VaR，历史数据模拟方法会参考该资产过去 100 天的市场表现并以其中表现倒数第五的那一天的回报作为对 VaR 的估计。该方法的一个缺点是历史数据是有限的，不能包括那些没发生的假设情况。我们所用的投资组合工具的历史数据可能没有包含崩盘的情况，但我们其实也希望在这些情况下能够对投资组合的表现进行建模。已有的技术可以使历史数据模拟方法对这些问题具有鲁棒性，比如在数据中引入“市场冲击”，这里我们将不做介绍。

9.2.3 蒙特卡罗模拟法

本章接下来的部分将重点介绍蒙特卡罗模拟。蒙特卡罗模拟通过模拟随机条件下的投资组合，来减少前面介绍的几种方法中的假设因素所带来的影响。当我们不能得到概率分布的解析解时，通常可以评估其概率密度函数（Probability Density Function，PDF)，方法是对服从该概率分布的简单随机变量进行重复采样，并对采样结果进行汇总统计。更一般地，该方法：

- 定义市场条件与每个金融工具的回报之间的关系，该关系表现为拟合历史数据的模型；
- 为那些容易采样的市场条件定义分布，这些分布也拟合历史数据；
- 在随机市场条件下进行试验；
- 计算每次试验的投资组合总体损失，用这些损失定义损失的经验分布，即如果运行 100 次试验来估算置信水平为 95% 时的 VaR，我们会选择试验中第五大的损失值，若要计算置信水平为 95% 时的 CVaR，我们需要计算最坏的五次试验的平均损失。

当然，蒙特卡罗方法也不是完美的。我们对产生试验条件的模型和推断金融工具表现的模型进行了简单假设，因此相应得到的分布的准确度没有基于变量 – 协变量和历史数据的评估方法高。

9.3　我们的模型

蒙特卡罗风险模型通常把每个金融工具的回报分解为一组市场因素的组合。常用的市场因素包括标普 500 指数、美国 GDP 和货币汇率等。接着我们需要一个模型根据这些市场条件来预测每个金融工具的回报。我们将在模拟中使用简单的线性模型。根据之前对回报的定义，一个因素的回报为给定时间段内市场因素值的变化。举个例子，如果标普 500 指数在一段时间内从 2000 点涨到 2100 点，那么回报为 100 点。对这些因素的回报进行简单转换可以得到一组特征。也就是说，给定试验 t 的市场因素向量 m_t，通过某个转换函数 φ 得到特征向量 f_t，f_t 向量的长度可能和向量 m_t 的长度不一样。

$$f_t = \phi(m_t)$$

为每个金融工具训练一个模型，该模型给每个特征赋予一个权重。下面给出了回报的计算公式，其中 r_{it} 为试验 t 中工具 i 的回报，c_i 为金融工具 i 的截距项（intercept term），w_{ij} 为特征 j 在金融工具 i 上的回归权重，f_{tj} 为特征 j 在试验 t 中产生的随机值：

$$r_{it} = c_i + \sum_{j=1}^{|w_i|} w_{ij} * f_{tj}$$

上述公式表示，每个金融工具的回报等于所有市场因素特征的回报与金融工具的权重的乘积之和。我们可以用历史数据来拟合每个金融工具的线型模型（也称为线性回归）。如果 VaR 的时间跨度为两周，回归问题把每个间隔两周的时间点当作具有标号的样本点。

需要指出的是，我们也可选用更复杂的模型。比如可以不用线性模型，而是用回归树技术或在模型中显式地加入特定领域的知识。

有了从市场因素中计算金融工具损失的模型之后，还需要一个模拟市场因素的方法。我们简单假设市场因素回报服从正态分布。为了考虑市场因素之间的相关性（比如纳斯达克指数下跌时道琼斯指数也很可能跟着下跌），我们使用多元正态分布，其协方差矩阵是非对角阵：

$$m_t \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$$

这里 μ 代表因素回报经验平均向量，Σ 代表市场因素回报经验协方差矩阵。

与前面讨论的一样，在模拟市场因素时，我们也可以选择更加复杂的方法。可以假定每个市场因素服从不同的分布类型，比如采用尾部更厚的分布。

9.4　获取数据

要找到大量格式规整的历史价格数据并非易事，但我们可以在 Yahoo! 上下载到大量 CSV 格式的股票数据。下面的脚本使用一系列 REST 调用来下载纳斯达克指数里所有股票的历

史数据，并将其存放在 stocks/ 目录下。该脚本在本书 GitHub 资料库的 risk/data 目录下：

```
$ ./download-all-symbols.sh
```

我们也需要这份历史数据的风险因素，包括标普 500 和纳斯达克指数值，还有 30 年期国债和原油价格数据。标普 500 和纳斯达克指数数据同样可以从 Yahoo! 上下载到：

```
$ mkdir factors/
$ ./download-symbol.sh SNP factors
$ ./download-symbol.sh NDX factors
```

国债和原油价格数据需要从 Investing.com 复制 / 粘贴过来。

9.5 数据预处理

然而我们的数据来源各不相同，格式也不一样。比如，从 Yahoo! 获取的 GOOGL 股票数据的前几行如下：

```
Date,Open,High,Low,Close,Volume,Adj Close
2014-10-24,554.98,555.00,545.16,548.90,2175400,548.90
2014-10-23,548.28,557.40,545.50,553.65,2151300,553.65
2014-10-22,541.05,550.76,540.23,542.69,2973700,542.69
2014-10-21,537.27,538.77,530.20,538.03,2459500,538.03
2014-10-20,520.45,533.16,519.14,532.38,2748200,532.38
```

Investing.com 原油价格历史数据格式如下：

```
Oct 24, 2014    81.01   81.95   81.95   80.36   272.51K -1.32%
Oct 23, 2014    82.09   80.42   82.37   80.05   354.84K 1.95%
Oct 22, 2014    80.52   82.55   83.15   80.22   352.22K -2.39%
Oct 21, 2014    82.49   81.86   83.26   81.57   297.52K 0.71%
Oct 20, 2014    81.91   82.39   82.73   80.78   301.04K -0.93%
Oct 19, 2014    82.67   82.39   82.72   82.39   -       0.75%
```

对每个数据源的每个金融工具和市场因素，我们可以用 `(date, closing price)` 元组列表来描述。可以用 Java 的 `SimpleDateFormat` 来解析从 Investing.com 获取的数据中的日期，代码如下：

```
import java.text.SimpleDateFormat

val format = new SimpleDateFormat("MMM d, yyyy")
format.parse("Oct 24, 2014")
res0: java.util.Date = Fri Oct 24 00:00:00 PDT 201
```

3000 个金融工具加 4 个市场因素的历史数据量较小，可以在本地进行读取和处理。即使对于涉及几十万个金融工具和几千个市场因素的较大型的模拟来说也是如此。然而，当模拟真正运行起来时，每个工具都需要进行大量的计算，这时我们就需要 Spark 这类分布式系统了。

现在从本地硬盘读取 Investing.com 全部的历史数据，代码如下：

```
import com.github.nscala_time.time.Imports._
import java.io.File
import scala.io.Source

def readInvestingDotComHistory(file: File):
    Array[(DateTime, Double)] = {
  val format = new SimpleDateFormat("MMM d, yyyy")
  val lines = Source.fromFile(file).getLines().toSeq
  lines.map(line => {
    val cols = line.split('\t')
    val date = new DateTime(format.parse(cols(0)))
    val value = cols(1).toDouble
    (date, value)
  }).reverse.toArray
}
```

和第 8 章一样，我们使用 JodaTime 及其 Scala 包装类 `NScalaTime` 来表示日期，将 `SimpleDateFormat` 的输出 `Date` 对象包装成 JodaTime 的 `DateTime` 实例。

现在读取全部的 Yahoo! 历史数据，代码如下：

```
def readYahooHistory(file: File): Array[(DateTime, Double)] = {
  val format = new SimpleDateFormat("yyyy-MM-dd")
  val lines = Source.fromFile(file).getLines().toSeq
  lines.tail.map(line => {
    val cols = line.split(',')
    val date = new DateTime(format.parse(cols(0)))
    val value = cols(1).toDouble
    (date, value)
  }).reverse.toArray
}
```

注意 `lines.tail` 用于去掉标题行。现在我们加载所有数据并过滤掉历史数据不足 5 年的金融工具，代码如下：

```
val start = new DateTime(2009, 10, 23, 0, 0)
val end = new DateTime(2014, 10, 23, 0, 0)

val files = new File("data/stocks/").listFiles()
val rawStocks: Seq[Array[(DateTime, Double)]] =
  files.flatMap(file => {
    try {
      Some(readYahooHistory(file))
    } catch {
      case e: Exception => None
    }
  }).filter(_.size >= 260*5+10)


val factorsPrefix = "data/factors/"
```

```
val factors1: Seq[Array[(DateTime, Double)]] =
  Array("crudeoil.tsv", "us30yeartreasurybonds.tsv").
  map(x => new File(factorsPrefix + x)).
  map(readInvestingDotComHistory)
val factors2: Seq[Array[(DateTime, Double)]] =
  Array("SNP.csv", "NDX.csv").
  map(x => new File(factorsPrefix + x)).
  map(readYahooHistory)
```

由于不同金融工具的交易日期可能不相同，或者由于其他原因数据中有些值缺失，因此我们有必要对不同的历史数据进行规范化处理。首先需要将时间序列数据统一到同一个时间区间。然后对有缺失的数据，需要为其填充数据。对于时间序列数据中缺失开始时间和结束时间的情况，我们用附近的日期填充即可，代码如下：

```
def trimToRegion(history: Array[(DateTime, Double)],
    start: DateTime, end: DateTime): Array[(DateTime, Double)] = {
  var trimmed = history.
    dropWhile(_._1 < start).takeWhile(_._1 <= end) ❶
  if (trimmed.head._1 != start) {
    trimmed = Array((start, trimmed.head._2)) ++ trimmed
  }
  if (trimmed.last._1 != end) {
    trimmed = trimmed ++ Array((end, trimmed.last._2))
  }
  trimmed
}
```

❶ 隐式地利用 ScalaTime 的运算符重载来比较日期。

对于一个时间序列的数据存在缺失值的情况，我们使用该工具上一个交易日的收盘价来代替。不幸的是，Scala 集合并没有提供现成的方法帮我们完成这个任务，所以我们还得自己写，具体代码如下：

```
import scala.collection.mutable.ArrayBuffer

def fillInHistory(history: Array[(DateTime, Double)],
    start: DateTime, end: DateTime): Array[(DateTime, Double)] = {
  var cur = history
  val filled = new ArrayBuffer[(DateTime, Double)]()
  var curDate = start
  while (curDate < end) {
    if (cur.tail.nonEmpty && cur.tail.head._1 == curDate) {
      cur = cur.tail
    }

    filled += ((curDate, cur.head._2))

    curDate += 1.days
    // 跳过周末
    if (curDate.dayOfWeek().get > 5) curDate += 2.days
  }
```

```
    filled.toArray
  }
```

将 trimToRegion 和 fillInHistory 函数应用在数据上：

```
val stocks: Seq[Array[Double]] = rawStocks.
  map(trimToRegion(_, start, end)).
  map(fillInHistory(_, start, end))

val factors: Seq[Array[Double] = (factors1 ++ factors2).
  map(trimToRegion(_, start, end)).
  map(fillInHistory(_, start, end))
```

stocks 的每个元素都是由某支股票在不同时间点的价格组成的数组。factors 结果和 stocks 一样。这些数组的长度应该都相等，我们可以用如下代码进行验证：

```
(stocks ++ factors).forall(_.size == stocks(0).size)
res17: Boolean = true
```

9.6 确定市场因素的权重

回顾一下，VaR 值代表一个给定时间段内的可能损失大小。我们关心的不是金融工具的绝对价格，而是在一段时间内金融工具价格的变化。在本章的计算中，我们将时间跨度设为两周。下面的函数利用了 Scala 集合的 sliding 方法将价格的时间序列转换成间隔为 2 周的价格移动交叠序列。注意，由于金融数据中不考虑周末，所以时间窗口为 10 而不是 14：

```
def twoWeekReturns(history: Array[(DateTime, Double)])
  : Array[Double] = {
  history.sliding(10).
    map(window => window.last._2 - window.head._2).
    toArray
}

val stocksReturns = stocks.map(twoWeekReturns)
val factorsReturns = factors.map(twoWeekReturns)
```

有了回报的历史数据，我们就可以回过来看看如何训练模型来预测金融工具回报。我们希望有一个模型可以根据两周内市场因素的回报来预测每个金融工具在相同时间段内的回报。为了简化问题，我们使用线性回归模型。

金融工具的回报与市场因素之间可能是非线性关系，为了对这个情况进行建模，我们可以在模型中加入一些附加的特征。对市场因素回报进行非线性变换可以得到这些特征。这里我们尝试对每个市场因素增加两个附加特征：市场因素的平方以及平方根。由于应变量仍然是特征的线性函数，从这个意义上讲，我们的模型仍然是线性模型，只不过有些特征正好由市场因素的非线性函数确定而已。请记住我们这里采用的这种特征转换只是为了说明问题，而在金融建模实践中，进行预测时采用的做法可能并不相同。

虽然由于每个金融工具都对应一次回归，我们这里执行了许多次回归，但是特征的数量和每次回归的数据量是其实是很小的。因此，在建立线性模型的过程中我们没必要使用 Spark 进行分布式运算，只要用 Apache Commons Math 工具包提供的普通最小二乘回归功能就足够了。虽然现在我们的市场因素数据是由历史数据组成的 `Seq`（每个 `Seq` 都是由 `(DateTime, Double)` 二元组组成的数组），但 `OLSMultipleLinearRegression` 要求数据为样本点数组（对我们的示例来说就是 2 周的时间段），所以我们需要对市场因素矩阵进行变换，代码如下：

```
def factorMatrix(histories: Seq[Array[Double]])
  : Array[Array[Double]] = {
  val mat = new Array[Array[Double]](histories.head.length)
  for (i <- 0 until histories.head.length) {
    mat(i) = histories.map(_(i)).toArray
  }
  mat
}

val factorMat = factorMatrix(factorsReturns)
```

现在我们可以处理附加的特征了，代码如下：

```
def featurize(factorReturns: Array[Double]): Array[Double] = {
  val squaredReturns = factorReturns.
    map(x => math.signum(x) * x * x)
  val squareRootedReturns = factorReturns.
    map(x => math.signum(x) * math.sqrt(math.abs(x)))
  squaredReturns ++ squareRootedReturns ++ factorReturns
}

val factorFeatures = factorMat.map(featurize)
```

然后拟合一个线性模型，代码如下：

```
import org.apache.commons.math3.stat.regression.OLSMultipleLinearRegression

def linearModel(instrument: Array[Double],
    factorMatrix: Array[Array[Double]])
  : OLSMultipleLinearRegression = {
  val regression = new OLSMultipleLinearRegression()
  regression.newSampleData(instrument, factorMatrix)
  regression
}

val models = stocksReturns.map(linearModel(_, factorFeatures))
```

为了节省篇幅我们省略了分析过程，但在这个点上，对于一个实际的应用处理管道（pipeline），有必要了解模型对数据的拟合程度。因为数据点是从时间序列上得到的，特别是时间窗口是交叠的，所以这些样本很有可能是自相关的（autocorrelated）。这就是说，如果采用像 R^2 之类的度量，我们很可能对模型的拟合程度作出乐观估计。Breusch-Godfrey

测试（http://en.wikipedia.org/wiki/Breusch–Godfrey_test）是对自相关性的影响进行评估的一种标准测试。这种快速评估模型的方法就是将时间序列拆分成两个集合。拆分时要注意取出的点处于中间位置，数据点要足够多，要保证前面一组的后面的点与后面一组的前面的点不是自相关的。然后在这个集合上进行模型训练，在另一个集合上检验误差。

可以用 `OLSMultipleLinearRegression` 的 `estimateRegressionParameters` 方法得到每个金融工具的模型参数，具体代码如下：

```
val factorWeights = models.map(_.estimateRegressionParameters())
  .toArray
```

现在我们得到了一个 1867 × 8 的矩阵，其中每一行代表一个金融工具的模型参数集合（这些参数可能是系数、权重、协变量、回归因子等）。

9.7　采样

有了将市场因素回报映射到金融工具回报的模型之后，接下来可以讨论怎样生成随机回报因素来模拟市场条件。也就是说，我们需要确定因素回报向量的一个概率分布并从该分布上采样。数据实际服从什么分布呢？为了回答此类问题，有必要先对数据进行可视化。连续概率分布的可视化可以采用密度曲线，它给出了在分布区间上的概率密度函数 PDF。由于我们不知道数据服从的分布，所以并没有一个公式可以帮助我们计算任意点上的概率密度。但我们可以使用一种称为核密度估计（kernel density estimation）的技术来粗略估计概率密度。不严格地讲，核密度估计是一种对直方图进行平滑处理的方法。它以每个数据点为中心建立一个概率分布（通常为正态分布），因此一个两周回报样本的集合将有 200 个正态分布，每个分布的总体均值都不一样。为了评估在给定点的概率密度，可以计算所有正态分布在这个点上的概率密度，然后取平均值。核密度曲线的平滑程度取决于它的带宽（bandwidth），也就是每个正态分布的标准差。本书的 GitHub 资料库上提供了一个核密度估计的实现，既可以用于 RDD，也可用于本地集合。为了节省篇幅我们这里不再赘述。

breeze-viz 是一个 Scala 工具，我们可以用它轻松地绘制简单图形。下面的代码绘制了样本集的密度曲线：

```
import com.cloudera.datascience.risk.KernelDensity
import breeze.plot._

def plotDistribution(samples: Array[Double]) {
  val min = samples.min
  val max = samples.max
  val domain = Range.Double(min, max, (max - min) / 100).
    toList.toArray
  val densities = KernelDensity.estimate(samples, domain)

  val f = Figure()
```

```
    val p = f.subplot(0)
    p += plot(domain, densities)
    p.xlabel = "Two Week Return ($)"
    p.ylabel = "Density"
  }

  plotDistribution(factorReturns(0))
  plotDistribution(factorReturns(1))
```

图 9-1 显示了国库券历史价格两周回报的概率分布（概率密度函数）。

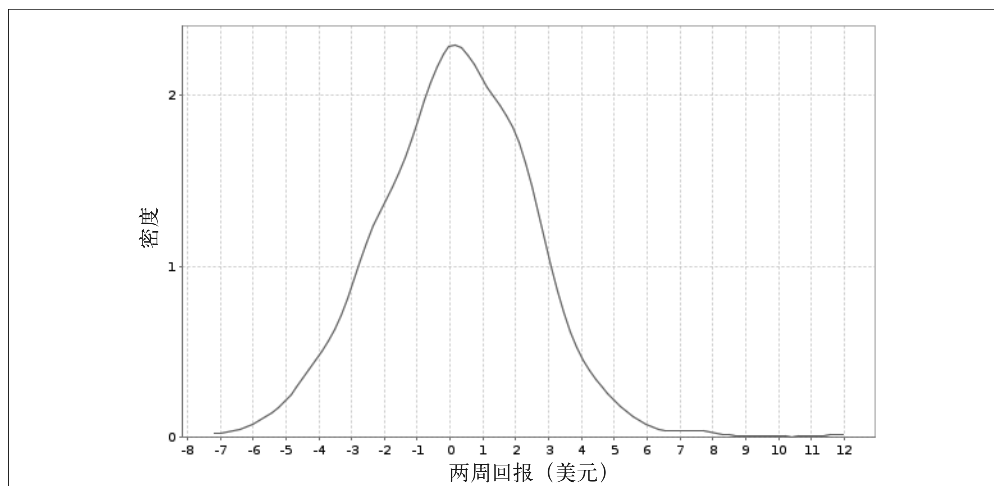


图 9-1：国债两周回报分布

图 9-2 显示了原油两周回报的概率分布。

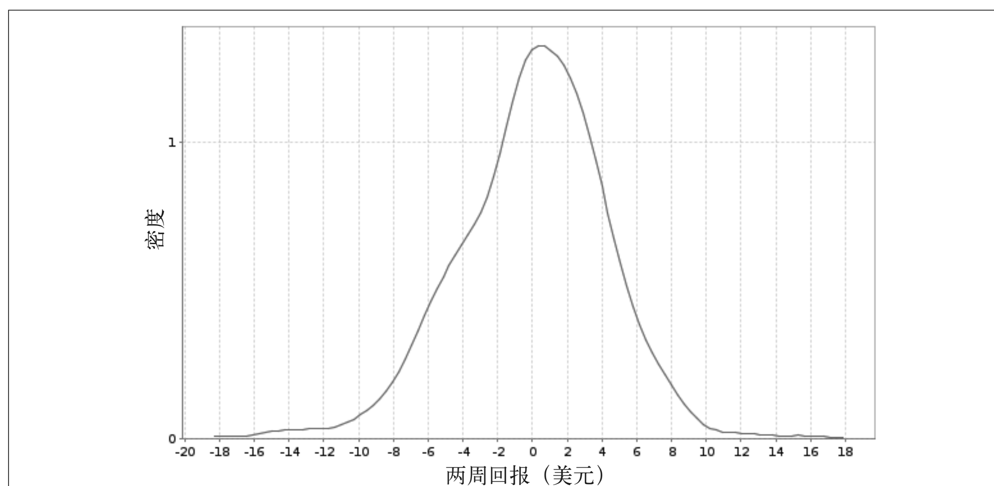


图 9-2：原油两周回报分布

我们将为每个因素回报拟合一个正态分布。有时候值得多花些精力寻找一个更符合实际情况的分布，比如尾部更厚的分布，能更好地拟合数据。但这里为了节省篇幅，就不深入介绍模拟的调优方法了。

最简单的因素回报采样方法是用一个正态分布拟合每个因素，然后对这个分布进行独立采样。然而，这里我们忽略了市场因素常常是相关的这个实际情况。如果标普指数下跌，道琼斯指数也可能跟着下跌。如果没有考虑到这些相关性，我们得到的风险预测（risk profile）的噪声将比实际情况要大。我们的市场因素是否相关呢？ Commons Math 中的皮尔森相关系数实现可以帮我们回答这个问题，代码如下：

```
import org.apache.commons.math3.stat.correlation.PearsonsCorrelation

val factorCor =
  new PearsonsCorrelation(factorMat).getCorrelationMatrix().getData()
println(factorCor.map(_.mkString("\t")).mkString("\n"))
1.0       -0.3483   0.2339    0.3975 ❶
-0.3483   1.0       -0.219    -0.4429
0.2339    -0.2198   1.0       0.3349
0.3975    -0.4429   0.3349    1.0
```

❶ 为了统一格式，我们只保留了小数点后的部分位数。

由于非对角线上有非零值，所以看来市场因素之间存在相关性。

多元正态分布

要考虑因素之间的相关性，可以使用多元正态分布。多元正态分布的每个样本是一个向量，在其他所有维度的值都确定的情况下，对于给定维度的值服从正态分布。但是，多个变量的联合分布并不是独立分布。

多元正态分布的参数为对应每个维度上的均值向量和一个矩阵，该矩阵描述了任意两个维度之间的协方差。对于 N 维的情况，由于我们要得到任何两个维度之间的协方差，所以协方差矩阵为 N 乘 N。如果协方差矩阵为对角阵，多元正态分布就退化成独立分布，但如果非对角线上存在非零值，那么表示相应的两个变量之间存在相关性。

VaR 相关文献常常提到因素权重转换步骤，经过权重转换，因素之间的相关性被去掉了，这样就可以进行采样了。这里常常用到柯列斯基分解（Cholesky Decomposition）或特征分解（Eigendecomposition）。这里我们可以直接调用 Apache Commons Math 工具包的 `MultivariateNormalDistribution`，它在底层使用了特征分解。

为了在本章数据上拟合一个多元正态分布，我们首先要得到其样本均值和协方差：

```
import org.apache.commons.math3.stat.correlation.Covariance
```

```
val factorCov = new Covariance(factorMat).getCovarianceMatrix().
  getData()

val factorMeans = factorsReturns.
  map(factor => factor.sum / factor.size).toArray
```

接下来以上面得到的均值和协方差为参数创建一个分布：

```
import org.apache.commons.math3.distribution.MultivariateNormalDistribution

val factorsDist = new MultivariateNormalDistribution(factorMeans,
  factorCov)
```

从分布中对市场条件进行一系列采样：

```
factorsDist.sample()
res1: Array[Double] = Array(2.6166887901169384, 2.596221643793665,
  1.4224088720128492, 55.00874247284987)

factorsDist.sample()
res2: Array[Double] = Array(-8.622095499198096, -2.5552498805628256,
  2.3006882454319686, -75.4850042214693)
```

9.8 运行试验

讨论完每个金融工具的模型和市场因素回报的采样过程，现在就可以开始运行实际的试验了。由于运行试验是个计算密集型的任务，所以我们最终还是要用 Spark 来对其进行并行化。在每次试验中，我们希望提取一组风险因素样本，用该样本预测每个金融工具的回报，然后将所有回报相加得到总体试验损失。为了使分布具有代表性，我们需要运行数千次甚至是数百万次试验。

有几种方式可以对模拟进行并行化，比如可以对试验进行并行化，也可以对金融工具进行并行化，或者同时对二者进行并行化。如果同时进行并行化，我们要创建一个金融工具的 RDD 和一个试验参数的 RDD，然后用笛卡尔转换 `cartesian` 来生成一个包含所有组合的 RDD。这种方法最通用，但有两个缺点：第一，该方法需要显式地创建试验参数 RDD，而这其实可以通过设置随机种子来避免；第二，它需要进行乱序操作。

对金融工具进行并行化的代码如下：

```
val randomSeed = 1496
val instrumentsRdd = ...
def trialLossesForInstrument(seed: Long, instrument: Array[Double])
  : Array[(Int, Double)] = {
  ...
}
instrumentsRdd.flatMap(trialLossesForInstrument(randomSeed, _)).
  reduceByKey(_ + _)
```

采用这种方式时，数据按照金融工具对 RDD 进行分区，对每个金融工具进行 `flatMap` 转换就可以得到每次试验的损失。对所有任务采用相同随机种子意味着生成的试验序列是相同的。`reduceByKey` 操作把同一个试验的对应的所有损失都汇总在一起。这种方式的缺点是它也需要进行乱序，数据量量级为 `O(|instruments| * |trials|)`。

本章中的几千个金融工具的模型数据非常小，所以可以直接放入每个执行器（executor）的内存里。粗略估算一下，即使有一百万个工具和数百个因素，执行器的内存也能存下。一百万个工具乘以五百个因素，再乘以每个因素权重所需的八个字节，总共约 4 GB，对当今大多数集群机器而言，将这些数据存放到每个执行器的内存里是完全可行的。因此我们应该将金融工具数据设为广播变量，每个执行器都有完整的金融工具数据的好处在于，每次实验的总体损失在单台机器上就能算出，这样就没必要在机器之间进行汇总。

对于按实验进行分区的方法（我们将使用这种方法），首先需要生成一个随机种子组成的 RDD，我们希望每个分区的随机种子都不一样，这样每个分区将产生不同的实验，代码如下：

```
val parallelism = 1000
val baseSeed = 1496

val seeds = (baseSeed until baseSeed + parallelism)
val seedRdd = sc.parallelize(seeds, parallelism)
```

随机数生成是一个耗时的过程，也是 CPU 密集型的任务。预先生成一组随机数然后在多个作业中使用通常效率较高，但本章不使用这个方法。由于蒙特卡罗实验假定随机数服从独立分发，因此为了符合该假设，不能在同一个作业中使用相同的随机数。如果要采用事先生成随机数的方法，我们只需将代码中的 `parallelize` 方法替换为 `textFile` 并加载事先生成好的 `randomNumbersRdd` 文件即可。

对每个随机种子，我们希望生成一组实验参数并观察这些参数对所有金融工具的影响。我们从底层开始，先写一个函数计算单个实验中单个工具的回报，只需应用之前训练好的每个工具对应的线性模型即可。由于回归参数的 `instrument` 数组包含了截距（intercept term），所以它的长度比 `trial` 数组大 1：

```
def instrumentTrialReturn(instrument: Array[Double],
    trial: Array[Double]): Double = {
  var instrumentTrialReturn = instrument(0)
  var i = 0
  while (i < trial.length) { ❶
    instrumentTrialReturn += trial(i) * instrument(i+1)
    i += 1
  }
  instrumentTrialReturn
}
```

❶ 因为此处对性能有很大影响，所以使用 `while` 循环，而没有用 Scala 的函数式编程。

接着，只需将所有工具的回报相加即可得到单个实验的全体回报：

```
def trialReturn(trial: Array[Double],
    instruments: Seq[Array[Double]]): Double = {
  var totalReturn = 0.0
  for (instrument <- instruments) {
    totalReturn += instrumentTrialReturn(instrument, trial)
  }
  totalReturn
}
```

最后，我们需要在每个任务中生成一系列实验。由于随机数的选择占该过程的很大一部分，所以有必要选用更强大的随机数生成器，这样就不容易产生重复的随机数。Commons Math 包中 Mersenne twister 的实现很适合，根据前面提到的方法，我们使用它对多元正态分布进行采样。注意，为了将生成的因素回报转换成模型中所需的特征格式，我们在生成的因素回报上应用了刚定义的 featurize 方法：

```
import org.apache.commons.math3.random.MersenneTwister

def trialReturns(seed: Long, numTrials: Int,
    instruments: Seq[Array[Double]], factorMeans: Array[Double],
    factorCovariances: Array[Array[Double]]): Seq[Double] = {
  val rand = new MersenneTwister(seed)
  val multivariateNormal = new MultivariateNormalDistribution(
    rand, factorMeans, factorCovariances)

  val trialReturns = new Array[Double](numTrials)
  for (i <- 0 until numTrials) {
    val trialFactorReturns = multivariateNormal.sample()
    val trialFeatures = featurize(trialFactorReturns)
    trialReturns(i) = trialReturn(trialFeatures, instruments)
  }
  trialReturns
}
```

现在准备工作就绪，我们可以用上述函数计算出一个 RDD，这个 RDD 的每个元素代表一次实验的总体回报。由于金融工具数据（即每个因素对每个工具的权重矩阵）很大，我们将它设为广播变量。这样每个执行器都只要对它进行一次反序列化即可。

```
val numTrials = 10000000
val bFactorWeights = sc.broadcast(factorWeights)

val trials = seedRdd.flatMap(
  trialReturns(_, numTrials / parallelism,
    bFactorWeights.value, factorMeans, factorCov))
```

现在回顾一下，我们对这些数字所做的所有操作都是为了计算 VaR。trials 现在代表了投资组合回报的经验分布。要计算置信水平为 95% 时的 VaR，需要找到在最差的 5% 和最好的 5% 的情况下的回报。有了经验分布，要得到这两个回报，只要找到经验分布上的一个

实验，对于该实验，有 5% 的实验回报比它低并且有 95% 的实验的回报都比它高。在驱动程序中用 takeOrdered 行动从所有实验中取出最差的 5% 就可以达到这个目的。这个表现最差的实验回报集合中的最高回报即为我们要求的 VaR。

```
def fivePercentVaR(trials: RDD[Double]): Double = {
  val topLosses = trials.takeOrdered(math.max(trials.count().toInt / 20, 1))
  topLosses.last
}

val valueAtRisk = fivePercentVaR(trials)
valueAtRisk: Double = -1752.8675055209305
```

用几乎完全一样的方法也能求出 CVaR。不过求 CVaR 时我们取最差的 5% 的实验回报集合的平均回报，而不是其中的最高回报。

```
def fivePercentCVaR(trials: RDD[Double]): Double = {
  val topLosses = trials.takeOrdered(math.max(trials.count().toInt / 20, 1))
  topLosses.sum / topLosses.length
}

val conditionalValueAtRisk = fivePercentVaR(trials)
conditionalValueAtRisk: Double = -2353.5692728118033
```

9.9 回报分布的可视化

除了计算一定置信水平下的 VaR 之外，我们还可以用它更全面地了解回归分布。回报服从正态分布吗？在极端情况下回报会不稳定吗？与我们之前为每个市场因素做过的方法类似，我们可以用核密度估计来估算联合概率分布的概率密度函数（见图 9-3）。再次说明，分布式估算核密度的代码（采用 RDD）可以参考本书随附的 GitHub 资料库：

```
def plotDistribution(samples: RDD[Double]) {
  val stats = samples.stats()
  val min = stats.min
  val max = stats.max
  val domain = Range.Double(min, max, (max - min) / 100)
    .toList.toArray
  val densities = KernelDensity.estimate(samples, domain)

  val f = Figure()
  val p = f.subplot(0)
  p += plot(domain, densities)
  p.xlabel = "Two Week Return ($)"
  p.ylabel = "Density"
}

plotDistribution(trials)
```

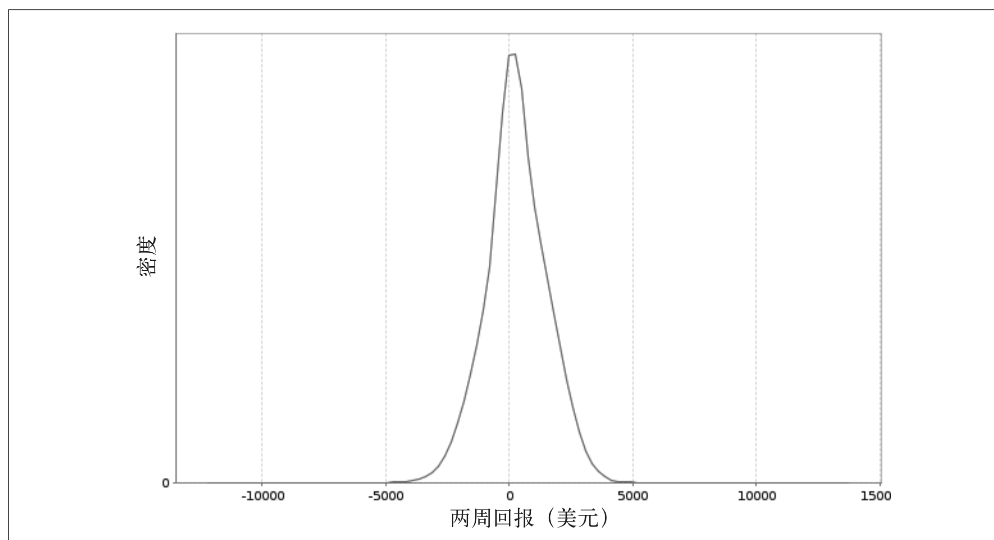


图 9-3：两周回报分布

9.10 结果的评估

怎样才能确定风险评估的好坏？怎样才能知道是否该进行更多次实验？一般地，蒙特卡罗模拟的误差与$1/\sqrt{n}$成正比。也就是说，通常实验次数增加 4 倍，那么误差就大约减半。

自举算法是计算 VaR 统计量置信区间的不错方法。通过在实验得到的投资组合回报集合上进行重复放回采样（repeatedly sampling with replacement），可以得到一个 VaR 的自举分布。每次我们从样本中取出与实验次数相等的样本，并根据这些取出的样本计算 VaR。所有计算出的 VaR 就形成了一个经验分布，只要根据该经验分布的分位数就能得到置信区间了。

下面给出计算 RDD 的所有统计量（即函数的 `computeStatistic` 参数）的自举置信区间。注意该函数使用了 Spark 的 `sample` 方法，第一个参数 `withReplacement` 设为 `true`，第二个参数设为 1.0，代表抽样大小等于数据集大小：

```
def bootstrappedConfidenceInterval(
    trials: RDD[Double],
    computeStatistic: RDD[Double] => Double,
    numResamples: Int,
    pValue: Double): (Double, Double) = {
  val stats = (0 until numResamples).map { i =>
    val resample = trials.sample(true, 1.0)
    computeStatistic(resample)
  }.sorted
  val lowerIndex = (numResamples * pValue / 2).toInt
  val upperIndex = (numResamples * (1 - pValue / 2)).toInt
```

```
  (stats(lowerIndex), stats(upperIndex))
}
```

接下来我们调用这个函数，并传入前面定义好的 `fivePercentVaR` 函数以从实验 RDD 中计算 VaR：

```
bootstrappedConfidenceInterval(trials, fivePercentVaR, 100, .05)
(-1754.9059171183192,-1751.0657037512767)
```

同样我们可以计算自举 CVaR：

```
bootstrappedConfidenceInterval(trials, fivePercentCVaR, 100, .05)
(-2356.2872000503235,-2351.231980404269)
```

置信区间提供了模型对于结果的置信水平信息，但并没有提供模型是否符合实际情况的信息。对于检测结果质量，在历史数据上进行回测（backtesting）是个不错的方法。对 VaR 的测试通常采用 Kupiec 提出的失败频率检验法（Proportion-of-Failures，POF）。POF 计算在多个历史时间段内的投资组合回报，然后计算损失超过 VaR 的次数。备择假设认为 VaR 是合理的，充分极限检验统计量认为 VaR 没有准确估计数据。下面我们给出检验统计量的公式，它依赖如下三个参数：计算 VaR 的置信水平参数 p、损失超过 VaR 的历史时间段的次数 x 和历史时间段的总次数 T：

$$-2\ln\left(\frac{(1-p)^{T-x}p^x}{\left(1-\frac{x}{T}\right)^{T-x}\left(\frac{x}{T}\right)^x}\right)$$

下面是在历史数据上计算检验统计量的代码。为了数值计算的稳定性更好，我们放大了对数值。

$$-2\left((T-x)\ln(1-p)+x\ln(p)-(T-x)\ln\left(1-\frac{x}{T}\right)-x\ln\left(\frac{x}{T}\right)\right)$$

```
var failures = 0
for (i <- 0 until stocksReturns(0).size) {
  val loss = stocksReturns.map(_(i)).sum
  if (loss < valueAtRisk) {
    failures += 1
  }
}
failures
...
155

val failureRatio = failures.toDouble / total
val logNumer = (total - failures) * math.log1p(-confidenceLevel) +
  failures * math.log(confidenceLevel)
val logDenom = (total - failures) * math.log1p(-failureRatio) +
  failures * math.log(failureRatio)
```

```
val testStatistic = -2 * (logNumer - logDenom)
...
96.88510361007025
```

如果备择假设为 VaR 是合理的，那么该检验统计量服从自由度为 1 的卡方分布。我们可以用 Commons Math 类 `ChiSquaredDistribution` 来计算检验统计值对应的 p 值：

```
import org.apache.commons.math3.distribution.ChiSquaredDistribution

1 - new ChiSquaredDistribution(1.0).cumulativeProbability(testStatistic)
```

结果 p 值很小，它表示我们有充足的证据拒绝“模型是合理的”这个备择假设。所以看来我们还需要进一步改进我们的模型。

9.11　小结

相对于金融机构实际应用的模型来说，本章练习中构造的模型还是一个非常粗略的初步结果。要构造一个准确的 VaR 模型，还有一些非常重要的步骤，但本章只进行了粗略的讨论。比如，市场因素的选择决定了模型的好坏，金融机构常常在模拟中引入数百个市场因素。

选择这些因素不但需要在历史数据上运行无数次试验，而且需要大量创新性实践。将市场因素映射为工具回报的预测模型也相当重要。本章中我们用了简单的线性模型，但许多模拟采用非线性函数或模拟布朗运动的时间轨迹。最后，还应该注意用于模拟因素回报的分布函数，Kolmogorov-Smirnoff 测试和卡方测试常用于测试经验分布的正态性，Q-Q 曲线图可以形象地比较不同分布。相比本章中采用的正态分布，尾部更厚的分布曲线通常能更好地反映金融风险。要想更好地了解此类分布曲线，可以参考 Markus Haas 和 Christian Pigorsch 的文章“Financial Economics, Fattailed Distributions”（http://bit.ly/1ACazwy）。

银行也使用 Spark 和大规模数据处理框架基于历史数据计算 VaR。想了解基于历史数据的 VaR 计算方法的概况和不同方法的表现，可以参考 Darryll Hendricks 的论文“Evaluation of Value-at-Risk Models Using Historical Data”（http://nyfed.org/1ACaI2O）。

蒙特卡罗风险模拟的作用并不只是计算单个统计量。通过影响投资决策，其结果还可用于主动降低投资组合的风险。举例来说，如果在回报最差的实验中一个特定的工具集合常常多次造成损失，就可以考虑将这些工具从投资组合中去掉，或者增加逆向对冲工具。

第10章

基因数据分析和BDG项目

作者：Uri Laserson

我们需要把地球上的 SCHPON（硫、碳、氢、磷、氧和氮，各种“卵”）发射到外太空。

——George M. Church

随着下一代 DNA 测序（next-generation DNA sequencing，NGS）技术的出现，生命科学迅速变成了一个数据驱动的领域。然而如何充分利用这些数据对传统计算生态系统是个不小的挑战。这些传统系统的分布式计算基于底层操作原语（比如 DRMAA 或 MPI）构造，所以它们很难用，而且使用纷繁复杂的半结构文本格式。

本章主要有三个目标。第一，面向普通 Spark 用户介绍一些新的序列化和文件格式（Avro 和 Parquet），这些格式可以很好地与 Hadoop 结合，大大简化了数据管理的许多问题。使用这些序列化技术可以实现紧凑的二进制表示、面向服务的架构和跨语言的兼容性，对许多情况我们都推荐使用它们。第二，面向那些有经验的生物信息学家介绍在 Spark 中如何完成典型的基因学任务。具体来说，我们用 Spark 操作大量基因学数据，对其进行处理、过滤，构造转录因子结合位点预测模型，并把 ENCODE 基因组标注与 1000 个 Genome 项目变体进行联结。最后，本章还可作为 ADAM 项目的教程。ADAM 项目提供了一组基因学相关的 Avro 模式以及大规模基因学分析的 Spark API 和命令行工具。ADAM 项目还基于 Hadoop 和 Spark 提供了 GATK 最佳实践的原生分布式实现。

本章介绍基因学的部分面向有经验的生物信息学家，他们对其中的典型问题比较熟悉。但

数据序列化部分对任何要处理大量数据的读者都适用。

10.1　分离存储与模型

生物信息学家在数据格式上花了太多精力，我们简单罗列一下这些格式，包括 .fasta、.fastq、.sam、.bam、.vcf、.gvcf、.bcf、.bed、.gff、.gtf、.narrowPeak、.wig、.bigWig、.bigBed、.ped、.tped 等一大串。更不用说这些科学家花了多少精力研究每个定制工具的定制格式。然而这些格式的规范要么不完整，要么太模糊（这样很难保证实现的一致性或兼容性），而且它们使用 ASCII 编码数据。ASCII 数据在生物信息学中用得非常普遍，但编码效率不高，压缩比相对较差。社区已经开始改进这些规范的不足之处，比如 https://github.com/samtools/hts-specs 就是一个例子。除此之外，数据必须经过解析和其他计算处理。由于实质上这些格式只有几种常用对象类型：对齐序列读数（aligned sequence read）、命名基因型（called genotype）、序列特征和表现型（phenotype），所以尤其麻烦。（术语“序列特征”在基因学中的含义有些含糊，本章中它的意思是 UCSC 基因组浏览器里的序列。）`biopython`（http://biopython.org/）之类的全能解析工具（比如 `Bio.SeqIO`）由于可以把各种文件格式转化为几种常用内存模型（比如 `Bio.Seq`、`Bio.SeqRecord` 和 `Bio.SeqFeature` 等），所以深受大家欢迎。

利用 Apache Avro 之类的序列化框架，我们可以把所有这些问题一并解决掉。Avro 的关键是它使数据模型（即显示模式）独立于底层数据存储格式和语言的内存表示：Avro 指定进程之间某种数据的通信方式，不管它是在互联网上跨进程通信，还是进程将数据写入某种文件格式。比如一个 Java 程序可以使用 Avro 将数据写入多种底层数据格式，但 Avro 的数据模型兼容所有这些格式。这样每个进程都不需要担心不同格式之间的兼容性，而只要知道怎样读取 Avro 数据模型即可，文件系统则知道如何生成 Avro 数据。

我们现在来看一个序列特征的示例。先用 Avro 接口定义语言（IDL）来给对象指定合适的模式：

```
enum Strand {
  Forward,
  Reverse,
  Independent
}
record SequenceFeature {
  string featureId;
  string featureType; ❶
  string chromosome;
  long startCoord;
  long endCoord;
  Strand strand;
  double value;
  map<string> attributes;
}
```

❶ 特征类型比如“conservation”“centipede”“gene”。

类型 `SequenceFeature` 可用于对保护水平、是否存在发起者或者核糖体结合位点、转录因子结合位点等进行编码。我们可以把它看成 JSON 格式的二进制版本，但 Avro 限制更多，性能也高得多。给定一个数据模式，Avro 规范精确规定对象的二进制编码，这样我们就可以轻易在进程之间（即使进程使用不同编程语言编写）传递对象，可以通过网络通信的方式，也可以通过将对象存储到磁盘的方式。Avro 项目提供处理 Avro 数据的多种语言编码模块，包括 Java、C/C++、Python 和 Perl。除此之外，编程语言还可以按照语言最优的方式将对象存入内存。使数据模型独立于存储格式的做法还提供了另一层灵活性或抽象。为了提高查询速度，我们可以将 Avro 数据序列化为二进制对象（Avro 容器文件）并以列式文件格式存储（比如 Parquet 文件），也可以为了最高的灵活性（牺牲了效率）而将 Avro 数据存为文本形式的 JSON 格式。最后，Avro 支持模式的进化，用户可以按需要随时添加新字段，软件会优雅地处理好新 / 老版本模式的兼容问题。

总之 Avro 是一个高效的二进制编码。有了它我们就可以轻松修改数据模式，处理多种编程语言产生的数据，并且将数据存成多种数据格式。使用 Avro 模式存储数据后，我们再也不用为越来越多的定制化数据格式操心，同时又能提高计算效率。

序列化 /RPC 框架

开源社区有许多序列化框架。大数据领域用得最多的序列化框架要数 Apache Avro、Apache Thrift 和 Google 公司的 Protocol Buffers。本质上它们都提供了一个 IDL，用于说明对象 / 消息类型的模式，而且都可以编译成许多不同编程语言。Thrift 在 Protocol Buffers 的 IDL 之上还可以指定 RPC（Google 也有一个 RPC 机制 Stubyy，但是 Stubyy 还没有开源）。最后在 IDL 和 RPC 之上，Avro 还提供了将数据存储到磁盘上的文件格式规范。要想泛泛地说哪个序列化框架适合哪种场合是不容易的，因为它们都支持不同的语言而且对不同语言的性能也各不相同。

对实际数据来说，前面示例中的 `SequenceFeature` 模型有些简单，但大数据基因（Big Data Genomics，BDG）项目（http://bdgenomics.org/）已经为我们提供了许多现成对象的 Avro 模式定义，比如：

- 表示读数的 `AlignmentRecord`
- 表示对某个位置基准观察的 `Pileup`
- 表示基因组变体和元数据的 `Variant`
- 表示一个基因位点的命名基因型 `Genotype`
- 表示序列特征（基因段标注）的 `Feature`

实际模式可以在 `bdg-formats` 的 GitHub 资料库（https://github.com/bigdatagenomics/bdg-formats）上找到。全球基因学和健康联盟也在开始开发自己的 Avro 模式（https://github.

com/ga4gh/schemas）。这应该不会造成 http://xkcd.com/927/ 的状况（这里面有太多相互竞争的 Avro 模式）。即使出现这种状况，相比目前那些定制的 ASCII 编码，Avro 还是在性能和数据建模方面有巨大优势。本章后面将使用几个 BDG 模式来完成一些典型的基因学任务。

10.2 用ADAM CLI导入基因学数据



本章在 Spark 中大量使用基因学项目 ADAM。该项目还在持续开发之中，包括它的文档也是。如果你碰到问题，一定要检查一下 GitHub 上最新的 README 文件、GitHub 问题跟踪器和 `adam-developer` 邮件列表。

BDG 核心基因学工具称为 ADAM。从一组映射读取（mapped read）开始，这些核心工具提供重复标注（mark-duplicate）、基本质量分数重校（base quality score recalibration，BQSR）、插入和缺失突变重新比对（indel realignment）和变体识别（variant calling）等功能。为了简化这些核心功能的使用，ADAM 还提供了一个命令行界面工具。相比于 HPC，这些命令行工具可以识别 Hadoop 和 HDFS，其中许多工具可以自动在整个集群中进行并行化而不用用户手动拆分文件或调度作业。

按照 README 文件的指示，我们可以构建 `adam` 项目：

```
git clone https://github.com/bigdatagenomics/adam.git
cd adam
export "MAVEN_OPTS=-Xmx512m -XX:MaxPermSize=128m"
mvn clean package -DskipTests
```

ADAM 提供一个作业提交脚本，可以实现与 Spark 的 `spark-submit` 的交互。使用该脚本最简单的方式可能就是给它一个别名：

```
export $ADAM_HOME=path/to/adam
alias adam-submit="$ADAM_HOME/bin/adam-submit"
```

按照 README 的说明，我们可以通过 `$JAVA_OPTS` 设置 JVM 选项，或者也可以参考 `appassembler` 文档以了解更多信息。现在应该可以从命令行上运行 ADAM 工具并得到如下消息：

```
$ adam-submit
...

     e            888~-_              e                 e    e
    d8b           888   \            d8b               d8b  d8b
   /Y88b          888    |          /Y88b             d888bdY88b
  /  Y88b         888    |         /  Y88b           / Y88Y Y888b
 /____Y88b        888   /         /____Y88b         /   YY   Y888b
/      Y88b       888_-~         /      Y88b       /          Y888b
```

```
Choose one of the following commands:

ADAM ACTIONS
              compare : Compare two ADAM files based on read name
            findreads : Find reads that match particular individual
                        or comparative criteria
                depth : Calculate the depth from a given ADAM file,
                        at each variant in a VCF
          count_kmers : Counts the k-mers/q-mers from a read
                        dataset.
    aggregate_pileups : Aggregate pileups in an ADAM reference-
                        oriented file
            transform : Convert SAM/BAM to ADAM format and
                        optionally perform read pre-processing
                        transformations
               plugin : Executes an ADAMPlugin
                    [etc.]
```

我们先得到一个 .bam 文件，里面包含一些 mapped NGS read，将它们转换为相应的 BDG 格式（这里也就是 `AlignedRecord`）并保存到 HDFS 上。首先我们取得一个合适的 .bam 文件并把它放到 HDFS 上。

```
# 注意该文件大小有16 GB
curl -O ftp://ftp-trace.ncbi.nih.gov/1000genomes/ftp/data\
/HG00103/alignment/HG00103.mapped.ILLUMINA.bwa.GBR\
.low_coverage.20120522.bam

# 也可以用Aspera,它的速度快得多

ascp -i path/to/asperaweb_id_dsa.openssh -QTr -l 10G \
anonftp@ftp.ncbi.nlm.nih.gov:/1000genomes/ftp/data/HG00103\
/alignment/HG00103.mapped.ILLUMINA.bwa.GBR\
.low_coverage.20120522.bam .

hadoop fs -put HG00103.mapped.ILLUMINA.bwa.GBR\
.low_coverage.20120522.bam /user/ds/genomics
```

接着可以用 ADAM 转换命令把 .bam 文件转成 Parquet 格式（请参考后面的“Parquet 格式和列式存储”）。该命令既能在集群上运行，也能在本地模式下运行。

```
adam-submit\
     transform \ ❶
    /user/ds/genomics/HG00103.mapped.ILLUMINA.bwa.GBR\
.low_coverage.20120522.bam \ ❷
    /user/ds/genomics/reads/HG00103
```

❶ ADAM 命令本身。

❷ 其余参数只针对 `transform` 命令。

这会使控制台产生大量输出，其中包括跟踪作业进度的 URL。我们来看看输出的具体

内容：

```
$ hadoop fs -du -h /user/ds/genomics/reads/HG00103
0        /user/ds/genomics/reads/HG00103/_SUCCESS
516.9 K  /user/ds/genomics/reads/HG00103/_metadata
101.8 M  /user/ds/genomics/reads/HG00103/part-r-00000.gz.parquet
101.7 M  /user/ds/genomics/reads/HG00103/part-r-00001.gz.parquet
[...]
104.9 M  /user/ds/genomics/reads/HG00103/part-r-00126.gz.parquet
12.3 M   /user/ds/genomics/reads/HG00103/part-r-00127.gz.parquet
```

结果数据集把 /user/ds/genomics/reads/HG00103/ 目录下所有的文件都合在一起，每个 part-*.parquet 文件对应一个 Spark 任务输出。你可能也会注意到数据的压缩效率比开始的 .bam 文件（底层是 gzip 压缩）要高，这要归功于列式存储：

```
$ hadoop fs -du -h "/user/ds/genomics/HG00103.*.bam"
15.9 G  /user/ds/genomics/HG00103. [...] .bam

$ hadoop fs -du -h -s /user/ds/genomics/reads/HG00103
12.6 G  /user/ds/genomics/reads/HG00103
```

我们在命令行里交互地看一个对象。首先用 ADAM 助手脚本启动 Spark shell。它默认的参数 / 选项与 Spark 脚本相同，但会加载所有必需的 JAR 文件。下面的示例中，Spark 运行在 YARN 上：

```
export SPARK_HOME=/path/to/spark
$ADAM_HOME/bin/adam-shell

...
14/09/11 17:44:36 INFO SecurityManager: [...]
14/09/11 17:44:36 INFO HttpServer: Starting HTTP Server
Welcome to
      ____              __
     / __/__  ___ _____/ /__
    _\ \/ _ \/ _ `/ __/  '_/
   /___/ .__/\_,_/_/ /_/\_\   version 1.2.1
      /_/

Using Scala version 2.10.4
  (Java HotSpot(TM) 64-Bit Server VM, Java 1.7.0_67)
[...lots of additional logging around setting up the YARN app...]

scala>
```

注意现在的任务是运行在 YARN 上的，交互式 Spark shell 要求是 `yarn-client` 模式，这时驱动程序在本地运行。同时我们也需要设置好 `HADOOP_CONF_DIR` 或者 `YARN_CONF_DIR`。现在把 aligned read 数据加载为 `RDD[AlignmentRecord]`：

```
import org.apache.spark.rdd.RDD
import org.bdgenomics.adam.rdd.ADAMContext._
```

```
import org.bdgenomics.formats.avro.AlignmentRecord

val readsRDD: RDD[AlignmentRecord] = sc.adamLoad(
  "/user/ds/genomics/reads/HG00103")
readsRDD.first()
```

这会输出许多日志（Spark 和 Parquet 的日志比较多）和结果本身：

```
res0: org.bdgenomics.formats.avro.AlignmentRecord =
{"contig":
 {"contigName": "X", "contigLength": 155270560,
  "contigMD5": "7e0e2e580297b7764e31dbc80c2540dd",
  "referenceURL": "ftp:\/\/ftp.1000genomes.ebi.ac.uk\/...",
  "assembly": null, "species": null},
 "start": 50194838, "end": 50194938, "mapq": 60,
 "readName": "SRR062642.27455291",
 "sequence": "TGACTCTGATGTTAAGATGCATTGTT...",
 "qual": ".LMMQPRQQPRQPILRQQRRIQQRQ...", "cigar": "100M",
 "basesTrimmedFromStart": 0, "basesTrimmedFromEnd": 0,
 "readPaired": true, "properPair": true, "readMapped":...}
```

（以上输出经过了修改以适应排版）你看到的读数可能不一样，原因是集群上数据的分区不同，不能保证哪条读数会先返回。

现在我们可以在数据集上交互式地提出问题，在问这些问题的同时集群在后台执行运算。数据集中有多少个读数？

```
readsRDD.count()
 ...
14/09/11 18:26:05 INFO SparkContext: Starting job: count [...]
...
res16: Long = 160397565
```

接着看看这些数据集中的读数是来自人类染色体吗？

```
val uniq_chr = (readsRDD
  .map(_.contig.contigName.toString)
  .distinct()
  .collect())
uniq_chr.sorted.foreach(println)
...
1
10
11
12
[...]
GL000249.1
MT
NC_007605
X
Y
hs37d5
```

很好！现在来更进一步分析这条语句：

```
val uniq_chr = (readsRDD  ❶
  .map(_.contig.contigName.toString) ❷
  .distinct() ❸
  .collect()) ❹
```

❶ 结果为 `RDD[AlignmentRecord]`，这个 RDD 包含了全部数据。

❷ 结果为 `RDD[String]`，我们从每个 `AlignmentRecord` 对象中提取 contig name 并将其转成字符串。

❸ 结果为 `RDD[String]`，会产生一个 reduce/shuffle 以将所有不同的 contig name 汇总起来；虽然这个 RDD 应该不大，但它还是一个 RDD。

❹ 结果为 `Array[String]`，这会触发计算并将 RDD 中的数据传到客户端应用（即 shell）。

假设我们使用下一代测序技术对个体进行囊性纤维化载体扫描，我们的基因型识别器给出的结果有点像过早终止密码子，但 HGMD（http://www.hgmd.cf.ac.uk/）和 Sickkids CFTR（http://www.genet.sickkids.on.ca/）数据库中都没有这种过早终止密码子。我们想回过头来看看原始基因序列数据并检查潜在有害基因型是否属于误报。为此需要人工分析变体位点，比如 7 号染色体所在的 117149189 位置对应的所有读数（如图 10-1 所示）：

```
val cftr_reads = (readsRDD
  .filter(_.contig.contigName.toString == "7")
  .filter(_.start <= 117149189)
  .filter(_.end > 117149189)
  .collect())
cftr_reads.length // cftr_reads是一个本地的Array[AlignmentRecord]
...
res2: Int = 9
```

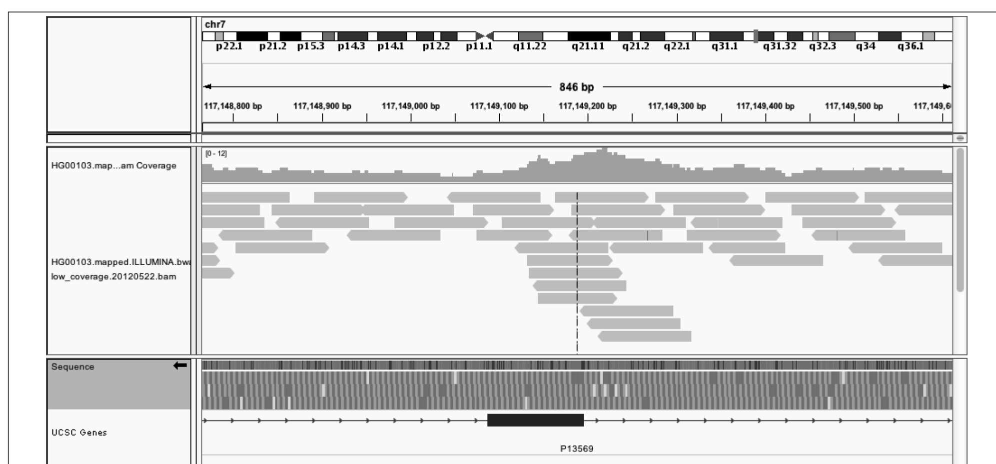


图 10-1：HG00103 在 CFTR 基因中 chr7:117149189 位置的 IGV 图像

现在我们可以人工检查这 9 个读数或者按照指定方式对齐它们，并检查报告的致病变体是否属于误报。下面是个小练习：请问 7 号染色体的平均覆盖率是多少？（这个值肯定很小，它不足以让我们可靠地判断给定未知的基因型。）

假设我们有一个向临床医生提供载体筛选服务的诊断室，用 Hadoop 对原始数据进行归档可以使数据保持在相对较“热”的状态（与磁带等归档技术相比）。除了可靠性高的优点之外，用 Hadoop 处理实际数据还能让我们很便捷地访问所有历史数据，这些历史数据可以用于质量控制（QC）或那些需要人工干预的场合，比如本章前面提到的 CFTR 示例。除了可以快速访问全部数据，数据集中存放后我们还能轻松地进行大规模分析，比如进行人口基因学分析、大规模 QC 分析，等等。

Parquet格式和列式存储

上一节，我们讨论了如何操作大量序列数据而不用担心底层存储规范或运算的并行化。但是，请注意 ADAM 项目用的是 Parquet 文件格式，该格式是这里性能大幅提升的原因。

Parquet 是一种开源文件格式规范，并且它提供了一套 reader/writer 实现。一般情况下对分析型查询用到的数据（一次写入多次读取），我们都推荐使用 Parquet 格式。该格式思想主要来源于 Google 的 Dremel 系统（请参考“Dremel: Interactive Analysis of Web-scale Datasets”（http://research.google.com/pubs/archive/36632.pdf）Proc. VLDB, 2010, by Melnik et al.）中底层的数据存储格式。Parquet 的数据模型可以和 Avro、Thrift 以及 Protocol Buffers 兼容。具体来说，它支持大多数常用数据库类型（整型、双精度、字符串等），也支持数组和记录类型，包括嵌套类型。更重要的是，它是一种列式文件格式，也就是说许多记录的某个列的值在磁盘上是连续存储在一起的（如图 10-2 所示）。这种物理数据布局大幅提升了数据编码 / 压缩的效率，并且通过减少读取 / 反序列化数据（http://the-paper-trail.org/blog/columnar-storage/）的量大幅减少了查询时间。Parquet 中可以为每列指定不同的编码 / 压缩机制，每列都支持 run-length 编码、dictionary 编码和 delta 编码。

Parquet 在提高性能方面另一个有用的功能是谓词下推（predicate pushdown）。谓词是一个表达式或者函数，它的值可以根据数据记录（也就是 SQL `WHERE` 子句中的表达式）计算出来，要么为 `true`，要么为 `false`。在前面我们的 CFTR 查询中，Spark 必须把每个 `AlignmentRecord` 全部反序列化 / 物化后才能再确定每个 `AlignmentRecord` 是否通过谓词测试。这会导致 I/O 和 CPU 时间的大量浪费。我们可以在 Parquet reader 实现中指定一个谓词类，这样在物化整个记录前我们可以只反序列化那些用于判断的必要列。

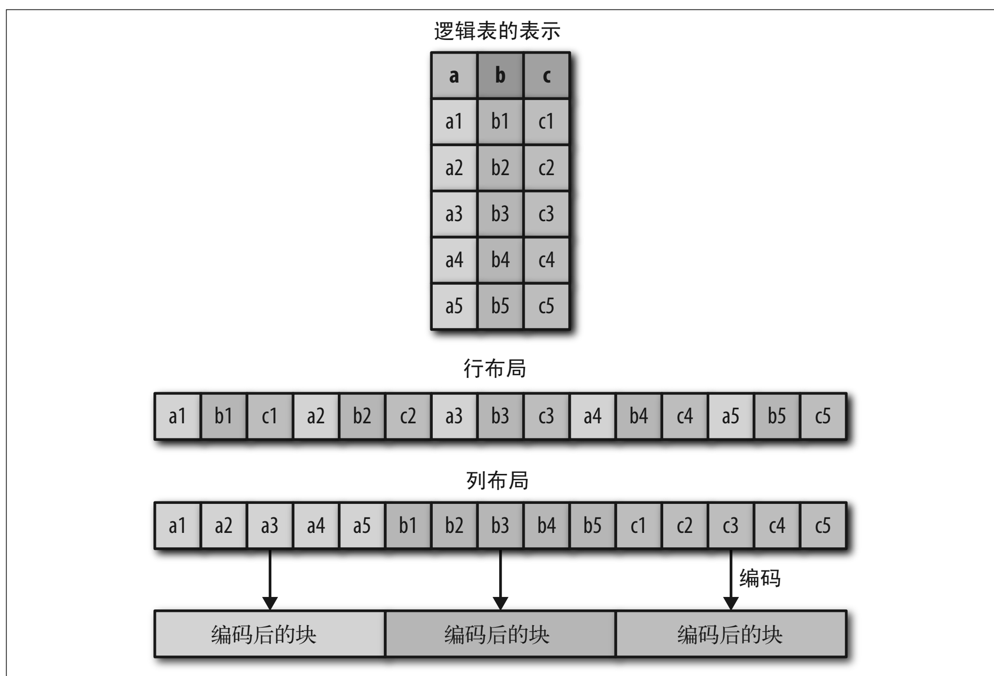


图 10-2：面向行和面向列的布局差异

比如要利用谓词下推技术实现我们的 CFTR 查询，需要先定义一个合适的谓词类，它用于测试 `AlignmentRecord` 是否是目标位点：

```
import org.bdgenomics.adam.predicates.ColumnReaderInput._
import org.bdgenomics.adam.predicates.ADAMPredicate
import org.bdgenomics.adam.predicates.RecordCondition
import org.bdgenomics.adam.predicates.FieldCondition

class CftrLocusPredicate extends ADAMPredicate[AlignmentRecord] {
  override val recordCondition = RecordCondition[AlignmentRecord](
    FieldCondition(
      "contig.contigName", (x: String) => x == "chr7"),
    FieldCondition(
      "start", (x: Long) => x <= 117149189),
    FieldCondition(
      "end", (x: Long) => x >= 117149189))
}
```

注意，要想谓词起作用，Parquet reader 必须要初始化类本身。这就意味着我们必须把代码编译成一个 JAR 文件，然后通过在 Spark 的 classpath 中加入该 JAR 文件使执行器也可以读到。之后我们就可以像下面代码所示的那样使用谓词了：

```
val cftr_reads = sc.adamLoad[AlignmentRecord, CftrLocusPredicate](
  "/user/ds/genomics/reads/HG00103",
```

```
Some(classOf[CftrLocusPredicate])).collect()
```

上述代码执行速度应该更快，因为它不再需要全部物化所有的 `AlignmentRecord` 对象。

10.3 从ENCODE数据预测转录因子结合位点

本例中我们将用公开的序列特征数据来构建一个简单的转录因子结合位点模型。转录因子（Transcription factors，TFs）是染色体中与某些位点结合的蛋白质，它有助于控制不同基因的表达。因此转录因子是确定一个细胞的基因型的关键，许多生理学和疾病过程都离不开它。染色质免疫沉淀测序（ChIP-seq）是一种基于 NGS 的实验，可以在基因组范围内描述对某个 TF 在某个细胞 / 组织类型中的位点结合。然而，ChIP-seq 成本高技术难度大，而且需要对每种组织和 TF 的两两组合进行单独实验。相比而言，DNase-seq 实验寻找染色体组内的开放的染色质，它对每种组织类型只做一次。与对每个组织 /TF 组合都进行基于 ChIP-seq 的 TF 结合位点实验不同，我们希望只要能拿到 DNase-seq 数据就可以预测新组织类型中的 TF 结合位点。

更具体地，我们将使用 DNase-seq 数据、已知序列主题数据（来源于 HT-SELEX，http://dx.doi.org/10.1016/j.cell.2012.12.009）和其他的一些公开的 ENCODE 数据集（https://www.encodeproject.org/）来预测 CTCF 转录因子的结合位点。我们选取了 6 种有 DNase-seq 和 CTCF ChIP-seq 数据的不同细胞类型。训练样本为 DNA 酶超敏（HS）峰值，标号来自 ChIP-seq 数据。

我们将使用如下细胞系数据：

- GM12878
  被广泛研究的淋巴细胞系（lymphoblastoid cell line）
- K562
  慢性粒细胞白血病细胞系（female chronic myelogenous leukemia）
- BJ
  皮肤成纤维细胞（skin fibroblast）
- HEK293
  胚肾细胞系（embryonic kidney）
- H54
  脑胶质瘤（glioblastoma）
- HepG2
  肝细胞癌（hepatocellular carcinoma）

首先我们把 .narrowPeak 格式的细胞系 DNase 数据下载下来：

```
hadoop fs -mkdir /user/ds/genomics/dnase
curl -s -L <...DNase URL...> \ ❶
  | gunzip \ ❷
  | hadoop fs -put - /user/ds/genomics/dnase/sample.DNase.narrowPeak
[...]
```

❶ 实际的 curl 命令请参考本书附带的 GitHub 资料库代码。

❷ 流式压缩。

接下来下载 CTCF 转录因子的 ChIP-seq 数据和 GENCODE 数据。ChIP-seq 数据也是 .narrowPeak 格式的，而 GENCODE 数据是 GTF 格式的。

```
hadoop fs -mkdir /user/ds/genomics/chip-seq
curl -s -L <...ChIP-seq URL...> \ ❶
  | gunzip \
  | hadoop fs -put - /user/ds/genomics/chip-seq/samp.CTCF.narrowPeak
[...]
```

❶ 实际的 curl 命令请参考本书附带的 GitHub 资料库代码。

注意，在把数据写到 HDFS 上的同时对数据流用 `gunzip` 解压。现在我们下载一些其他的数据集，有了这些数据就可以从中得到用于预测的特征：

```
# gh19人类基因组序列
curl -s -L -O \
  "http://hgdownload.cse.ucsc.edu/goldenPath/hg19/bigZips/hg19.2bit"
```

最后 conservation 数据是 fixed wiggle 格式的，不能把它作为一个可拆分文件进行读取。所以在读取色度坐标元数据时，任务无法知道在文件中要往后读多少数据，因此我们要在往 HDFS 上写数据的同时将 .wigFix 转换成 BED 格式。

```
hadoop fs -mkdir /user/ds/genomics/phylop
for i in $(seq 1 22); do
    curl -s -L <...phyloP.chr$i URL...> \ ❶
      | gunzip \
      | adam-submit wigfix2bed \
      | hadoop fs -put - "/user/ds/genomics/phylop/chr$i.phyloP.bed"
done
[...]
```

❶ 实际的 curl 命令请参考本书附带的 GitHub 资料库代码。

最后，我们在 Spark shell 中将 phyloP 数据从基于文本的 .bed 格式一次性转换成 Parquet 格式。

```
(sc
  .adamBEDFeatureLoad("/user/ds/genomics/phylop_text")
  .adamSave("/user/ds/genomics/phylop"))
```

我们想从所有原始数据生成如下模式的训练数据：

1．DNase 超敏感位点 ID（DNase HS peak ID）
2．染色体（chromosome）
3．开始位置（start）
4．结束位置（end）
5．最高 TF 主题 PWM 分数（TF motif PWM score）
6．平均 phyloP 保护分数（phyloP conservation score）
7．最大 phyloP 保护分数
8．最小 phyloP 保护分数
9．到最近转录起始位点（TSS）的距离
10．转录因子类型（TF identity）（本例中一直是 CTCF）
11．细胞系（cell line）
12．转录因子结合状态（布尔值，目标变量）

现在来生成用于创建 `RDD[LabeledPoint]` 的数据集。我们需要对多个细胞系生成数据，因此对每个细胞系都定义一个 RDD，然后再将它们连接在一起：

```
❶

val cellLines = Vector(
  "GM12878", "K562", "BJ", "HEK293", "H54", "HepG2")
val dataByCellLine = cellLines.map(cellLine => { ❷
   ❸
})

❹
```

❶ 加载必要的标注数据。

❷ 对每个细胞系……

❸ ……生成一个 RDD 以便转换成 `RDD[LabeledPoint]`。

❹ 把 RDD 串在一起之后输入给 MLlib 等。

开始之前，我们先加载在整个计算过程中都要用到的一些数据，包括会话转录开始位点、人类基因组参考序列和来自 HT-SELEX（http://dx.doi.org/10.1016/j.cell.2012.12.009）的 CTCF PWM：

```
// 加载人类基因组参考序列
val bHg19Data = sc.broadcast(
  new TwoBitFile(
```

```
    new LocalFileByteAccess(
      new File("/user/ds/genomics/hg19.2bit"))))

val phylopRDD = (sc.adamLoad[Feature, Nothing]("/user/ds/genomics/phylop")
  // 清理掉phylop数据中一些异常数据
  .filter(f => f.getStart <= f.getEnd))

val tssRDD = (sc.adamGTFFeatureLoad(
    "/user/ds/genomics/gencode.v18.annotation.gtf")
  .filter(_.getFeatureType == "transcript")
  .map(f => (f.getContig.getContigName, f.getStart)))

val bTssData = sc.broadcast(tssRDD
  // 按contig name分组
  .groupBy(_._1)
  // 为每个染色体建立TSS点位Vector
  .map(p => (p._1, p._2.map(_._2.toLong).toVector))
  // 收集到本地内存结构中以便广播
  .collect().toMap)

//  来自http://dx.doi.org/10.1016/j.cell.2012.12.009的CTCF PWM
val bPwmData = sc.broadcast(Vector(
  Map('A'->0.4553,'C'->0.0459,'G'->0.1455,'T'->0.3533),
  Map('A'->0.1737,'C'->0.0248,'G'->0.7592,'T'->0.0423),
  Map('A'->0.0001,'C'->0.9407,'G'->0.0001,'T'->0.0591),
  Map('A'->0.0051,'C'->0.0001,'G'->0.9879,'T'->0.0069),
  Map('A'->0.0624,'C'->0.9322,'G'->0.0009,'T'->0.0046),
  Map('A'->0.0046,'C'->0.9952,'G'->0.0001,'T'->0.0001),
  Map('A'->0.5075,'C'->0.4533,'G'->0.0181,'T'->0.0211),
  Map('A'->0.0079,'C'->0.6407,'G'->0.0001,'T'->0.3513),
  Map('A'->0.0001,'C'->0.9995,'G'->0.0002,'T'->0.0001),
  Map('A'->0.0027,'C'->0.0035,'G'->0.0017,'T'->0.9921),
  Map('A'->0.7635,'C'->0.0210,'G'->0.1175,'T'->0.0980),
  Map('A'->0.0074,'C'->0.1314,'G'->0.7990,'T'->0.0622),
  Map('A'->0.0138,'C'->0.3879,'G'->0.0001,'T'->0.5981),
  Map('A'->0.0003,'C'->0.0001,'G'->0.9853,'T'->0.0142),
  Map('A'->0.0399,'C'->0.0113,'G'->0.7312,'T'->0.2177),
  Map('A'->0.1520,'C'->0.2820,'G'->0.0082,'T'->0.5578),
  Map('A'->0.3644,'C'->0.3105,'G'->0.2125,'T'->0.1127)))
```

现在我们定义一些工具函数，这些工具函数可以用于生成标号、PWM 打分和 TSS 距离等特征：

```
// 寻找最近转录开始点位的函数
// 简单实现……有待完善
def distanceToClosest(loci: Vector[Long], query: Long): Long = {
  loci.map(x => abs(x - query)).min
}

// 基于TF PWM计算主题分数
def scorePWM(ref: String): Double = {
  val score1 = ref.sliding(bPwmData.value.length).map(s => {
    s.zipWithIndex.map(p => bPwmData.value(p._2)(p._1)).product
  }).max
```

```
    val rc = SequenceUtils.reverseComplement(ref)
    val score2 = rc.sliding(bPwmData.value.length).map(s => {
      s.zipWithIndex.map(p => bPwmData.value(p._2)(p._1)).product
    }).max
    max(score1, score2)
  }

  // 将DNase最高点标注为是否是结合点位的函数
  // 计算一个区间和一组区间之间的重叠
  // 简单实现,因为我们知道ChIP-seq最高点,所以该实现才能行得通
  // 没有重叠(怎样验证没有重叠?作为练习,请读者自行验证)
  def isOverlapping(i1: (Long, Long), i2: (Long, Long)) =
    (i1._2 > i2._1) && (i1._1 < i2._2)

  def isOverlappingLoci(loci: Vector[(Long, Long)],
                        testInterval: (Long, Long)): Boolean = {
    @tailrec
    def search(m: Int, M: Int): Boolean = {
      val mid = m + (M - m) / 2
      if (M <= m){
        false
      } else if (isOverlapping(loci(mid), testInterval)) {
        true
      } else if (testInterval._2 <= loci(mid)._1) {
        search(m, mid)
      } else {
        search(mid + 1, M)
      }
    }
    search(0, loci.length)
  }
```

最后，我们定义一个在每个细胞系上进行数据计算的“loop”循环体。注意，我们读取的是文本形式的 ChIP-seq 和 DNase 数据，因为数据集不是特别大，所以对性能影响不大。

首先我们把 DNase 和 ChIP-seq 数据加载为 RDD：

```
val dnaseRDD = sc.adamNarrowPeakFeatureLoad(
  s"/user/ds/genomics/dnase/$cellLine.DNase.narrowPeak")
val chipseqRDD = sc.adamNarrowPeakFeatureLoad(
  s"/user/ds/genomics/chip-seq/$cellLine.ChIP-seq.CTCF.narrowPeak")
```

接下来定义一个在 DNase 特征上产生目标标号（“binding”或“not binding”）的函数，该函数要能同时访问所有 ChIP-seq 峰值，因此我们把原始 ChIP-seq 数据加载到内存，将其设为广播变量 `bBindingData` 并广播到所有节点：

```
val bBindingData = sc.broadcast(
  chipseq
    // 安装染色体对最高点进行分组
    .groupBy(_.getContig.getContigName.toString) ❶
    // 对每个chr和每个ChIP-seq最高点提取开始位置和结束位置
    .map(p => (p._1, p._2.map(f =>
```

```
      (f.getStart: Long, f.getEnd: Long)))) ❷
    // 对每个chr对最高点(没有重叠)进行排序
    .map(p => (p._1, p._2.toVector.sortBy(x => x._1))) ❸
    // 收集到本地内存结构以便广播
    .collect().toMap)
```

❶ RDD[(String, Iterable[Feature])]。

❷ RDD[(String, Iterable[(Long, Long)])]。

❸ RDD[(String, Vector[(Long, Long)])]。

这个操作提供了一个 Map，其中 key 是染色体名称，value 是位置不重叠的 (start, end) 对的一个 Vector。现在我们定义真正的标号函数：

```
def generateLabel(f: Feature) = {
  val contig = f.getContig.getContigName
  if (!bBindingData.value.contains(contig)) {
    false
  } else {
    val testInterval = (f.getStart: Long, f.getEnd: Long)
    isOverlappingLoci(bBindingData.value(contig), testInterval)
  }
}
```

要计算 conservation 特征（使用 phyloP 数据），必须把 DNase 和 phyloP 数据联结在一起。因为联结的是区间，所以我们用 ADAM 中的 BroadcastRegionJoin 功能，它计算非重叠区域并通过广播所收集到的数据执行 replicated 联结：

```
val dnaseWithPhylopRDD = (
  BroadcastRegionJoin.partitionAndJoin(sc, dnaseRDD, phylopRDD)
    // 按DNase最高点对保护值进行分组
    .groupBy(x => x._1.getFeatureId)
    // 计算每个最高点保护水平统计统计量
    .map(x => {
       val y = x._2.toSeq
       val peak = y(0)._1
       val values = y.map(_._2.getValue)
       // 计算phylop特征
       val avg = values.reduce(_ + _) / values.length
       val m = values.max
       val M = values.min
       (peak.getFeatureId, peak, avg, m, M)
     }))
```

现在我们计算每个 DNase 峰值的最终特征集合，其中也包括目标变量：

```
// 生成最终元组集合
dnaseWithPhylopRDD.map(tup => {
  val peak = tup._2
  val featureId = peak.getFeatureId
  val contig = peak.getContigName.getContigName
```

```
    val start = peak.getStart
    val end = peak.getEnd
    val score = scorePWM(
      bHg19Data.value.extract(ReferenceRegion(peak)))
    val avg = tup._3
    val m = tup._4
    val M = tup._5
    val closest_tss = min(
      distanceToClosest(bTssData.value(contig), peak.getStart),
      distanceToClosest(bTssData.value(contig), peak.getEnd))
    val tf = "CTCF"
    val line = cellLine
    val bound = generateLabel(peak)
    (featureId, contig, start, end, score, avg, m, M, closest_tss,
      tf, line, bound)
  })
```

这个最终的 RDD 在遍历细胞系的每次循环中都要计算一次。最后我们把每个细胞系的 RDD 结合在一起，并且缓存在内存中为模型训练做准备：

```
val preTrainingData = dataByCellLine.reduce(_ ++ _)
preTrainingData.cache()

preTrainingData.count() // 801263
preTrainingData.filter(_._12 == true).count() // 220285
```

现在为了训练分类器，我们可以对 `preTrainingData` 中的数据进行归一化并将其转换成 `RDD[LabeledPoint]`，详细情况可以参考第 4 章。注意，这里要执行交叉验证，应该在每个 fold 中取出一个细胞系用于验证。

10.4 查询1000 Genomes项目中的基因型

在这个示例中，我们要导入全部 1000 Genomes 基因型数据集。我们先把原始数据下载下来并直接存放到 HDFS 上，解压，然后运行 ADAM 作业将数据转成 Parquet 格式。下面的示例命令应该针对所有染色体运行，它在整个集群中并行执行：

```
curl -s -L ftp://.../1000genomes/.../chr1.vcf.gz \ ❶
  | gunzip \
  | hadoop fs -put - /user/ds/genomics/1kg/vcf/chr1.vcf ❷

export SPARK_JAR_PATH=hdfs:///path/to/spark.jar
adam/bin/adam-submit --conf spark.yarn.jar=$SPARK_JAR_PATH \
  vcf2adam \ ❸
  -coalesce 5 \
  /user/ds/genomics/1kg/vcf/chr1.vcf \
  /user/ds/genomics/1kg/parquet/chr1
```

❶ 实际的 curl 命令请参考本书附带的 GitHub 资料库代码。

❷ 将文本 VCF 文件复制到 Hadoop 上。

❸ 运行 VCF 以在集群范围内执行 ADAM（Parquet）转换。

注意我们指定 `-coalesce 5` 的方式。这会保证映射任务会将数据压缩为少数几个大的 Parquet 文件。接着在 ADAM shell 中我们加载并检查对象，代码如下：

```
import org.bdgenomics.adam.rdd.ADAMContext._
import org.bdgenomics.formats.avro.Genotype

val genotypesRDD = sc.adamLoad[Genotype, Nothing](
  "/user/ds/genomics/1kg/parquet")
val gt = genotypesRDD.first()
...
```

例如对每个与 CTCF 绑定点重叠的基因变体，我们来计算在所有样本上少数等位基因出现的频率。本质上，我们需要把上一节中的 CTCF 数据和 1000 Genomes 项目中的基因型数据进行联结：

```
val ctcfRDD = sc.adamNarrowPeakFeatureLoad(
  "/user/ds/genomics/chip-seq/GM12878.ChIP-seq.CTCF.narrowPeak")
val filtered = (BroadcastRegionJoin.partitionAndJoin(
  sc, ctcfRDD, genotypesRDD) ❶
  .map(_._2)) ❷
```

❶ `BroadcastRegionJoin` 的内联结实现过滤。

❷ 这个 mapper 最后产生一个 `RDD[Genotype]`。

我们还需要一个输入为 `Genotype` 并计算参考 / 替换等位基因个数的函数：

```
def genotypeToAlleleCounts(gt: Genotype): (Variant, (Int, Int)) = {
  val counts = gt.getAlleles.map(allele match {
    case GenotypeAllele.Ref => (1, 0)
    case GenotypeAllele.Alt => (0, 1)
    case _ => (0, 0)
  }).reduce((x, y) => (x._1 + y._1, x._2 + y._2))
  (gt.getVariant, (counts._1, counts._2))
}
```

最后我们生成一个 `RDD[(Variant, (Int, Int))]` 并进行汇总：

```
val counts = filtered.map(genotypeToAlleleCounts)
val countsByVariant = counts.reduceByKey(
  (x, y) => (x._1 + y._1, x._2 + y._2))
val mafByVariant = countsByVariant.map(tup => {
  val (v, (r, a)) = tup
  val n = r + a
  (v, math.min(r, a).toDouble / n)
})
```

遍历整个数据集是个大型操作。因为我们只用到基因型数据中的几个字段，所以进行谓词下推和投影肯定是有帮助的，这可以作为练习留给读者自行完成。

10.5 小结

许多基因学方面的计算都很适合用 Spark 计算模式处理。如果你进行实地分析，ADAM 这样的项目最有价值的贡献是提供了一组表示底层分析对象（及其转换工具）的 Avro 模式。本章中，我们看到只要将数据转换成相应的 Avro 模式，许多大规模计算都比较容易表达和并行化。

虽然基于 Hadoop/Spark 进行科学研究的工具可能还有很多，但现在已经有一些现成的项目可用，我们不必再重新发明轮子。本章我们研究了 ADAM 提供的核心功能，但这个项目已经实现了整个 GATK 最佳实践中的管道任务，包括 BQSR、插入和缺失突变重新比对、去重。除了 ADAM 之外，许多机构都已加入全球基因学和健康联盟，这个组织也开始提供它自己的基因分析模式。西奈山医学院的震荡实验室开发了一组主要用于致癌基因变体研究的 Guacamole 工具。所有这些工具都使用 Apache v2 开源许可，大家可以自由使用。如果你在工作中用到了这些工具，别忘了把改进建议也回馈给社区哦！

第11章

基于PySpark和Thunder的神经图像数据分析

作者：Uri Laserson

人类大脑像一坨凉粥，但我们对此并不感兴趣。

——Alan Turing

随着影像设备和自动化领域的技术发展，大脑功能数据也急剧增长。过去的实验只能靠在头上放几个电极来收集大脑产生的时间序列数据，或者只能拿到大脑的几张静态截面图像，而今天的技术能够在一个不小的机体活跃区域里，在大量神经元上采集大脑活动数据。奥巴马政府也已经签署了 BRAIN 计划。为了推动技术进步，该计划制定了宏伟的目标，其中一个目标是同时记录很长一段时间内每个老鼠脑神经的电子活动。测量技术方面的突破固然重要，但我们认为该计划产生的数据量将开创生物学研究的新模式。

本章将介绍 PySpark API（http://spark.apache.org/docs/latest/api/python/）。有了该 API，我们可以通过 Python 与 Spark 交互。本章还会介绍 Thunder 项目（http://thefreemanlab.com/thunder/），它构建在 PySpark 之上，目的是处理海量时间序列数据，特别是处理神经影像数据。PySpark 是一个特别灵活的工具，可以帮我们进行探索式的大数据分析，它紧密集成 PyData 生态系统的其他工具，包括可视化工具 matplotlib，甚至是“可执行文档”工具 IPython Notebook（Jupyter）。

利用这些工具可以在一定程度上了解斑马鱼的大脑结构。利用 Thunder 可以对斑马鱼大脑的不同区域（代表不同神经元群组）进行聚类，这样就可以找到斑马鱼随时间变化的大脑活动模式。

11.1 PySpark简介

Python 具有高级语法并且有很多工具包可用，所以很多数据科学家都喜欢用 Python。虽然传统上 Python 语言很难和 JVM 集成，但鉴于 Python 对数据分析的重要性，Spark 生态系统开始致力于开发 Spark 的 Python API。

Python 与科学计算和数据科学

在科学计算和数据科学领域，人们更喜欢 Python 工具。许多基于 MATLAB、R 或 Mathematica 的传统应用都迁移到 Python 之上了。究其原因，我们总结出如下几个方面：

- Python 是一门高级语言，使用简单，学起来也容易；
- Python 包含了大量的工具包，从小众的数值计算到网页抓取工具再到数据可视化工具，它无所不包；
- Python 可以便捷地和 C/C++ 进行交互，这样人们就可以使用 C/C++ 的高性能工具包，比如 BLAS/LAPACK/ATLAS 等。

这里有几个工具需要读者特别记住。

- `numpy/scipy/matplotlib`

  这三个工具提供了 MATLAB 的典型功能，包括快速矩阵运算、科学计算函数，还提供了绘图工具，这些工具被广泛使用，其思想也源于 MATLAB。

- `pandas`

  该工具的功能和 R 的 `data.frame` 类似，但启动效率往往要比 `data.frame` 高不少。

- `scikit-learn/statsmodels`

  这两个工具提供了高质量的机器学习算法（分类 / 回归、聚类、矩阵分解等）的实现和统计模型实现。

- `nltk`

  一个深受欢迎的自然语言工具。

可以在 https://github.com/vinta/awesome-python 这个网址上找到大量其他 Python 工具包。

启动 PySpark 与启动 Spark 一样：

```
export IPYTHON=1 # PySpark也可使用IPython shell
pyspark --master ... --num-executors ...  ❶
```

❶ `pyspark` 的输入参数和 Spark 的 `spark-submit`、`spark-shell` 参数一样。

可以用 `spark-submit` 来提交 Python 脚本，`spark-submit` 能根据脚本文件的扩展名 .py 来识别脚本。PySpark 支持 IPython shell，只要设置环境变量 `IPYTHON=1` 即可，这是我们推荐的做法。当 Python 脚本启动时，它会创建一个 Python 的 `SparkContext` 对象，我们通过该对象和集群交互。创建好 `SparkContext` 之后，PySpark API 的用法和 Scala API 非常类似。比如，要加载 CSV 数据，我们可以这样做：

```
raw_data = sc.textFile('path/to/csv/data') # RDD[string]
# 对数据进行过滤,按逗号进行拆分并解析浮点数以得到RDD[list[float]]
data = (raw_data
    .filter(lambda x: x.startswith("#"))
    .map(lambda x: map(float, x.split(','))))
data.take(5)
```

和 Scala API 一样，我们先加载一个文本文件，过滤掉其中以 `#` 开头的行，然后将 CSV 数据解析为一个浮点数列表。如在上面的示例代码中，我们向 `filter` 和 `map` 传递函数参数所示，Python 中把函数作为参数进行传递的方式是非常灵活的。传递函数时需要将一个 Python 对象作为输入并且返回一个 Python 对象（对于示例代码中的 `filter` 函数而言，返回值为布尔值）。传递函数时唯一的限制是 Python 对象必须能用 `cloudpickle` 序列化（`cloudpickle` 包含了匿名 lambda 函数），并且函数闭包引用的任何模块都必须能在 Python 执行器进程的 `PYTHONPATH` 中找到。为了确保 Python 执行器进程找到这些模块，要么在整个集群上安装这些模块并在 Python 执行器进程的 `PYTHONPATH` 中加入它们，要么由 Spark 显式分发相应的 ZIP/EGG 模块文件，这样 Spark 会在分发之后将它们加入 `PYTHONPATH` 中。显式分发可以通过调用 `sc.addPyFile()` 来实现。

PySpark RDD 只是 Python 对象的 RDD，和 Python 列表一样，PySpark RDD 可以存储混合类型对象（因为底层所有对象都是 `PyObject` 类型的）。

PySpark API 的发布会一定程度上滞后于 Scala API，所以有时 Scala 功能会更早发布。除了核心 API 之外，已经有一个调用 MLlib 的 Python API 可用，比如 Thunder 中就使用了这个 API。

深入PySpark

为了简化调试，同时也为了让读者了解可能的性能陷阱，有必要介绍一些 PySpark 的底层实现，请参见图 11-1。

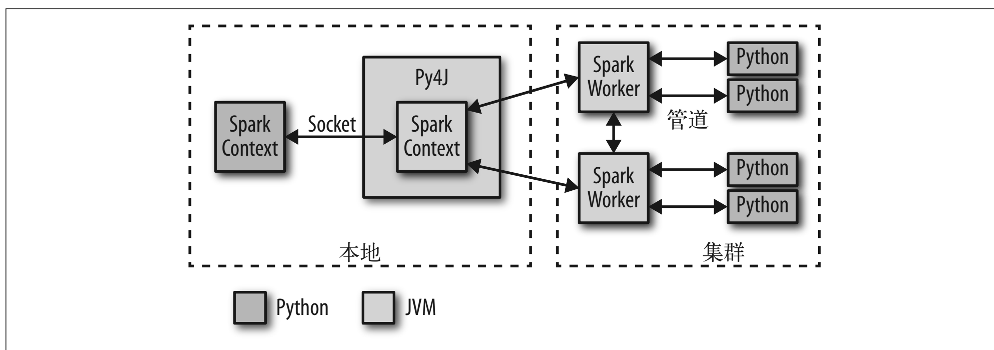


图 11-1：PySpark 内部架构

PySpark 的 Python 解释器在启动时会同时启动一个 JVM，Python 解释器与 JVM 进程之间通过套接字保持通信。PySpark 利用 Py4J 项目来处理 Python 解释器和 JVM 之间的通信。JVM 作为实际的 Spark 驱动程序会加载一个 `JavaSparkContext`，`JavaSparkContext` 和集群中的 Spark 执行器通信。接着，对 `SparkContext` 对象的 Python API 调用会被翻译为对 `JavaSparkContext` 对象的 Java API 调用。举个例子，PySpark 的 `sc.textFile()` 实现将调用分派给 `JavaSparkContext` 的 `.textFile` 方法，该方法最终与 Spark 执行器的 JVM 通信，从而实现从 HDFS 上加载文本数据。

集群上的 Spark 执行器为每个 CPU 核启动一个 Python 解释器，并在需要执行用户代码时通过管道与这个解释器进行数据通信。在本地 PySpark 客户端的 Python RDD 对应于本地 JVM 内的一个 `PythonRDD` 对象。和 RDD 相关的数据实际上是以 Java 对象的形式保持在 Spark 的 JVM 中的。举例来说，在 Python 解释器中运行 `sc.textFile()` 将会调用 `JavaSparkContext` 的 `textFile` 方法，该方法会把集群中的数据加载为 Java `String` 对象。类似地，用 `newAPIHadoopFile` 加载一个 Parquet/Avro 文件会把对象加载为 Java Avro 对象。

如果是在 Python RDD 上调用 API，所有相关代码（即 Python 的 lambda 函数）将通过 `cloudpickle` 进行序列化并分发到执行器上。接着，代码的序列化数据由 Java 对象转成 Python 兼容的表示形式（即 pickle 对象）并通过一个管道以流的方式传给执行器相关的 Python 解释器。所有需要 Python 处理的内容都在解释器中执行，结果数据又反过来存储为 JVM 中的 RDD（默认为 pickle 对象）。

相比 Scala，Python 对可执行代码序列化的内置支持不算强大。因此 PySpark 的作者使用一个定制化模块“cloudpickle”。cloudpickle 由 PiCloud 项目开发，不过 PiCloud 现在已不活跃了。

用 IPython Notebook（Jupyter）搭建 PySpark

IPython Notebook 是一个非常好的探索式分析环境，可以用作支持运算的“实验笔记本”。用户可以把文本、图像和可执行代码（代码用 Python 语言编写，不过现在也可以用其他语言编写）集成在一起，并且支持托管平台等特性。虽然 IPython Notebook 可以和 Spark 很好地集成，但由于 PySpark 要按特定方式进行初始化，所以配置时需要小心，否则很可能出现配置错误。如果想了解更多详细信息，请参看博客：http://blog.cloudera.com/blog/2014/08/how-to-use-ipython-notebook-with-apache-spark/。

11.2 Thunder工具包概况和安装

Thunder 示例和文档

Thunder 包的文档和教程写得非常好。下面的示例引自 Thunder 教程和它所提供的数据集。

Thunder 是 Spark 上的一个的 Python 工具集，用于处理大型空间 / 时间数据集（即大型多维矩阵）。Thunder 大量使用 NumPy 进行矩阵运算，同时也大量使用 MLlib 工具来实现某些分布式统计技术。由于基于 Python，所以 Thunder 非常灵活而且用户很广。在接下来的一节，我们将介绍 Thunder API 并利用 MLlib 的 *K* 均值算法实现对神经轨迹进行聚类，这里的 *K* 均值算法实现是经过 Thunder 和 PySpark 包装过的版本。

Thunder 依赖 Spark 和 Python 工具包 NumPy、SciPy、matplotlib 和 scikit-learn。安装 Thunder 非常简单，运行 `pip install thunder-python` 命令即可。不过安装时要将 Git 资料库本身签出，这样就可以使用除 Spark 1.1 和 Hadoop 1.x 之外的任何部分（请参考下面附注栏中的说明）。Thunder 也提供了一些脚本，用于简化 Amazon EC2 上的部署，这些脚本在传统的 HPC 环境下也验证过。

Thunder 搭配不同的 Hadoop/Spark 版本

截至本书写作时，Thunder 默认基于 Hadoop 1.x 版本 API 构建，不能直接基于 Hadoop 2.x API 构建（如果要运行 YARN，必须使用 Hadoop 2.x）。同样，通过 `pip` 来安装 Thunder 也是基于 Hadoop 1.x 和 Spark 1.1，因为此时包含了一个预编译好的 Thunder JAR 文件，这个文件是在 Hadoop 1.x 和 Spark 1.1 上编译的。如果要在 Hadoop 2.x 上构建 Thunder，请修改 Thunder 库中的 scala/build.sbt 文件，将 Hadoop 设为合适的版本。Thunder 的 Hadoop 版本应该和 Spark 的 Hadoop 版本保持一致（这同样需要修改 SBT 文件）。

安装并设置完 `SPARK_HOME` 环境之后，就可以启动 Thunder：

```
$ export IPYTHON=1 # 像往常一样推荐
$ thunder

[...some logging output...]
Welcome to
      ____              __
     / __/__  ___ _____/ /__
    _\ \/ _ \/ _ `/ __/  '_/
   /__ / .__/\_,_/_/ /_/\_\   version 1.1.0
      /_/

Using Python version 2.7.6 (default, Apr  9 2014 11:54:50)
SparkContext available as sc.

Running thunder version 0.5.0_dev
A thunder context is available as tsc

In [1]:
```

这说明 `thunder` 命令基本上就是把 PySpark 包装了一下。和 PySpark 类似，大部分计算都是从 `ThunderContext` 类型的变量 `tsc` 开始，`tsc` 用一些 Thunder 特有的功能对 Python 的 `SparkContext` 进行了包装。

11.3 用Thunder加载数据

Thunder 在设计的时候特别考虑了神经影像数据集，因此比较适合分析那些通常随时间变化的大型影像数据集。

我们先加载样例数据集中的一些斑马鱼大脑图像。这些样例数据来自 Thunder 资料库，目录为 python/thunder/utils/data/fish/tif-stack（https://github.com/thunder-project/thunder/tree/master/thunder/utils/data/fish/）。为了演示方便，本章示例的数据集只是原数据集的很小一部分。完整的数据集可以通过 AWS 得到，比如我们通过调用 `ThunderContext.loadExampleEC2()` 函数得到完整的数据集。斑马鱼是生物学研究普遍采用的模式生物，它个体小，繁殖快，可用作脊椎动物培育的模式生物。人们对斑马鱼的兴趣也源自它超快的繁殖能力。由于斑马鱼是透明的，大脑不大，在神经科学研究中基本上可以对其整个大脑摄取图像，而且这些图像的高分辨率高到足以区分个体神经元的程度。下面是加载数据集的代码：

```
path_to_images = (
    'path/to/thunder/python/thunder/utils/data/fish/tif-stack')
imagesRDD = tsc.loadImages(path_to_images,
    inputformat='tif-stack') ❶

print imagesRDD
print imagesRDD.rdd
...
<thunder.rdds.images.Images object at 0x109aa59d0>
PythonRDD[8] at RDD at PythonRDD.scala:43
```

❶ `tif-stack` 是一种图像格式，每个文件在 z 维度上可以有多个平面影像。

这创建了一个 `Images` 对象，它最终封装了一个 RDD，这个 RDD 可以通过 `imagesRDD.rdd` 来访问。 `Images` 对象对外也提供了几个相似的相关功能（比如 `count`、`take` 等）。在 `Images` 内部，对象以键 – 值对的形式存放。

```
print imagesRDD.first()
...
(0, array([[[26, 25],
          [26, 25],
          [26, 25],
          ...,
          [26, 26],
          [26, 26],
          [26, 26]],
         ...,
         [[25, 25],
          [25, 25],
          [25, 25],
          ...,
          [26, 26],
          [26, 26],
          [26, 26]]], dtype=uint8))
```

键为 `0` 对应数据集中第零个图像（按数据目录的字母顺序排列），值是对应图像的一个 NumPy 数组。Thunder 中所有的核心数据类型最终都是键 – 值对的 Python RDD，其中键是某种元组而值为 NumPy 数组。即使 PySpark 通常允许异构集合的 RDD，RDD 中所有键和值的类型也都相同。由于这种同构性，`Images` 对象对外提供了描述底层图像的一个属性 `.dims`：

```
print imagesRDD.first()[1].shape ❶
...
(76, 87, 2)  ❸

print imagesRDD.dims ❷
...
Dimensions: min=(0, 0, 0), max=(75, 86, 1), count=(76, 87, 2)
print imagesRDD.nimages
...
20
```

❶ 由第一个键 – 值对组成的 NumPy 数组的维度信息。

❷ 这个 RDD 中数据对应的 Thunder `Dimensions` 对象。

❸ RDD 中每个“图像”实际上是由两个 76 × 87 的图像组成的叠层。

我们的数据集由 20 个“图像”组成，每个图像都是一个 76 × 87 × 2 的叠层。Thunder 提供了 `Dimensions` 对象，可以用它得到 RDD 中数据的维度信息。

像素、体元和叠层

“像素”（pixel）一词是“图像元素”（picture element）两个词构成的合成词。数字图像可以简单建模为二维（2D）矩阵，矩阵中每个元素即为一个像素，其值代表颜色的强度（一张彩色图片需要三个这样的矩阵来表示，分别代表红色、绿色和蓝色）。但大脑是三维的，单个 2D 切面很难捕捉大脑的活动。有多种技术可以处理这个问题，有的将不同平面上的多个 2D 图像堆叠在一起（即一个 *z* 叠层），有的甚至直接生成 3D 信息（比如光场显微技术）。这最终会产生一个 3D 的强度矩阵，每个值代表一个立体元素或体元。同样，Thunder 根据特定的数据类型也把所有图像建模成 2D 或 3D 矩阵，并且能够识别像 .tiff 这样的文件格式，.tiff 格式能原生的表示 3D 叠层。

用 Python 写代码的一个特点就是我们在操作 RDD 时能轻松进行可视化。这里我们使用功能强大的 matplotlib 工具包（见图 11-2）。

```
import matplotlib.pyplot as plt
img = imagesRDD.values().first()
plt.imshow(img[:, : ,0], interpolation='nearest', aspect='equal',
    cmap='gray')
```

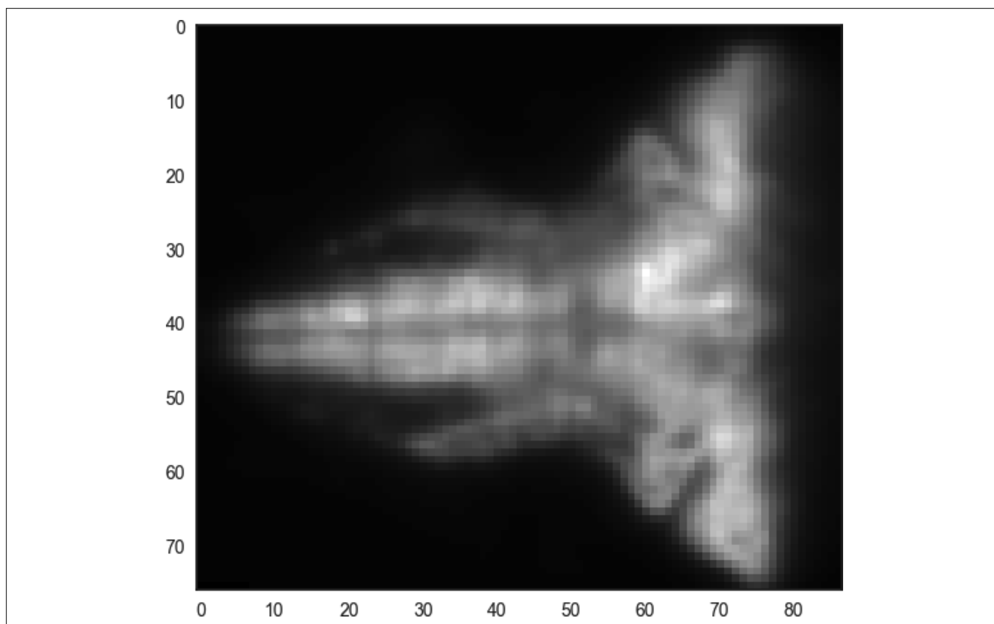


图 11-2：原生斑马鱼数据的一个切面

`Images` API 提供强大的分布式图像处理能力，比如对每个图像进行二次采样（如图 11-3）：

```
subsampled = imagesRDD.subsample((5, 5, 1)) ❶
plt.imshow(subsampled.first()[1][:, : ,0], interpolation='nearest',
```

```
    aspect='equal', cmap='gray')
print subsampled.dims
...
Dimensions: min=(0, 0, 0), max=(15, 17, 1), count=(16, 18, 2)
```

❶ 第一行我们直接对三个维度进行采样，这里只用了一行代码；注意这是一个 RDD 操作，所以该行代码立即返回，只有等到出现 RDD 行动时才触发实际的计算。

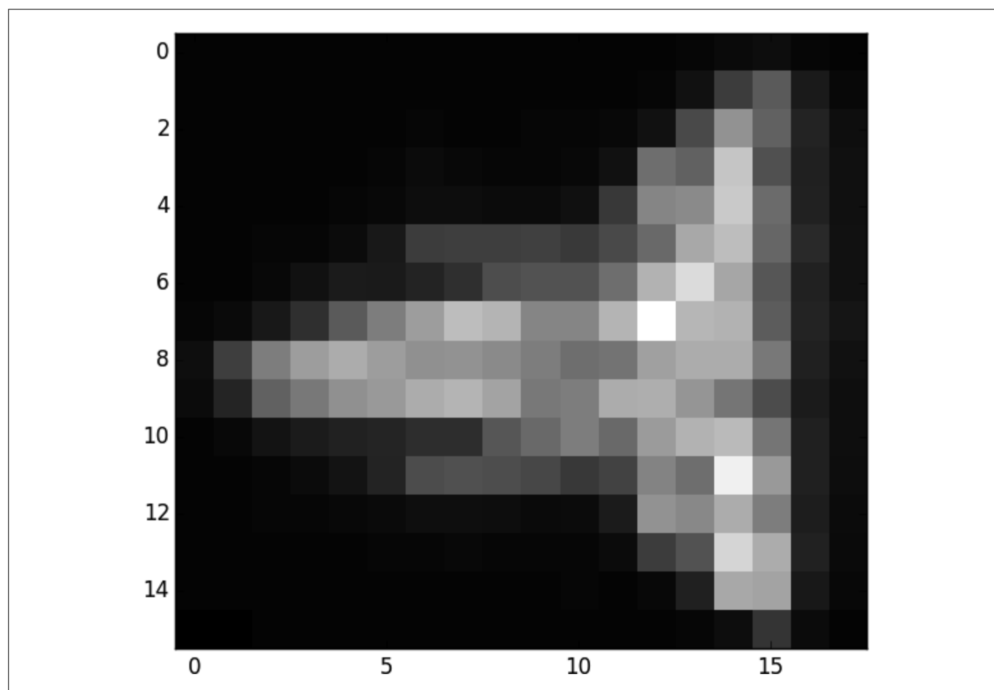


图 11-3：对斑马鱼数据进行二次采样得到的一个切面

虽然分析图像集合对某些操作是有用的（比如对图像进行某种归一化），但它很难处理图像之间的时间关系。

```
seriesRDD = imagesRDD.toSeries()
```

这个操作把数据大规模重组为一个 `Series` 对象。`Series` 是一个键 – 值对的 RDD，键是每个图像的坐标元组（也就是体元标识符），值是一个代表时间序列的一维 NumPy 数组：

```
print seriesRDD.dims
print seriesRDD.index
print seriesRDD.count()
...
Dimensions: min=(0, 0, 0), max=(75, 86, 1), count=(76, 87, 2)
[ 0  1  2  3  4  5  6  7  8  9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19]
13224
```

imagesRDD 是包含 20 个带有维度（76 × 87 × 2）的图像，seriesRDD 包含 13 224（76 × 87 × 2）个长度为 20 的时间序列。同时请注意，执行 seriesRDD.dims 会生成一个作业，因为我们只有通过对 Series 对象的所有键 – 值进行分析才能得出维度信息。seriesRDD.index 属性是一个 Pandas 风格的索引，可以用它引用每个数组。因为原始图像是三维的，所以键是三元组：

```
print seriesRDD.rdd.takeSample(False, 1, 0)[0]
...
((30, 84, 1), array([35, 35, 35, 35, 35, 35, 35, 35, 34, 34,
       34, 35, 35, 35, 35, 35, 35, 35, 35, 35], dtype=uint8))
```

Series API 提供许多时序运算方法，这些方法可以在单个时间序列上进行计算，也可以对所有的时间序列进行计算，比如：

```
print seriesRDD.max()
...
array([158, 152, 145, 143, 142, 141, 140, 140, 139, 139, 140, 140,
       142, 144, 153, 168, 179, 185, 185, 182], dtype=uint8)
```

上面的代码在每个时间点上计算所有体元的最大值。

```
stddevRDD = seriesRDD.seriesStdev()
print stddevRDD.take(3)
print stddevRDD.dims ❶
...
[((0, 0, 0), 0.4), ((1, 0, 0), 0.0), ((2, 0, 0), 0.0)]
Dimensions: min=(0, 0, 0), max=(75, 86, 1), count=(76, 87, 2)
```

上面的代码计算每个时间序列的标准差并且返回结果 RDD，RDD 中保留了所有键。

❶ 该属性自动从父 RDD 继承过来，所以这时并不需要 Spark 计算，因为我们已经对 seriesRDD 计算出了 Dimension。

也可以在本地将 Series 重新包装为 Dimension 形式（这里为 76 × 87 × 2）：

```
repacked = stddevRDD.pack()
plt.imshow(repacked[:,:,0], interpolation='nearest', cmap='gray',
    aspect='equal')
print type(repacked)
print repacked.shape
...
<type 'numpy.ndarray'>
(76, 87, 2)
```

这时我们就可以用同样的空间关系绘制每个体元的标准差（如图 11-4 所示）。应该注意不要向客户端返回太多数据，因为这样会占用很多带宽和内存资源。

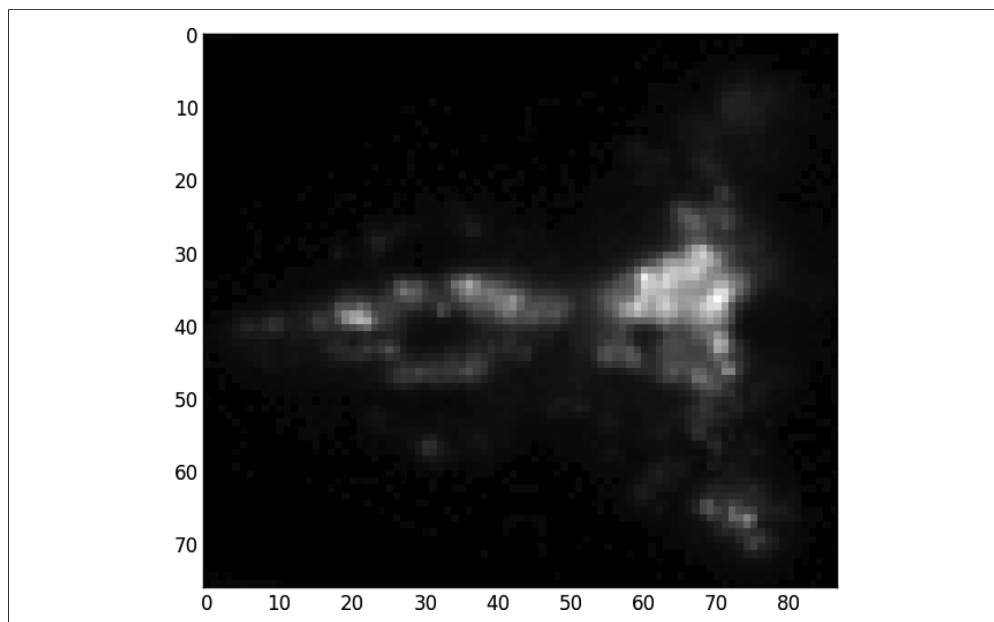


图 11-4：原始斑马鱼数据中每个体元的标准差

同样，可以通过绘制中部的时间序列来直接观察一下这些时间序列（如图 11-5 所示）：

```
plt.plot(seriesRDD.center().subset(50).T)
```

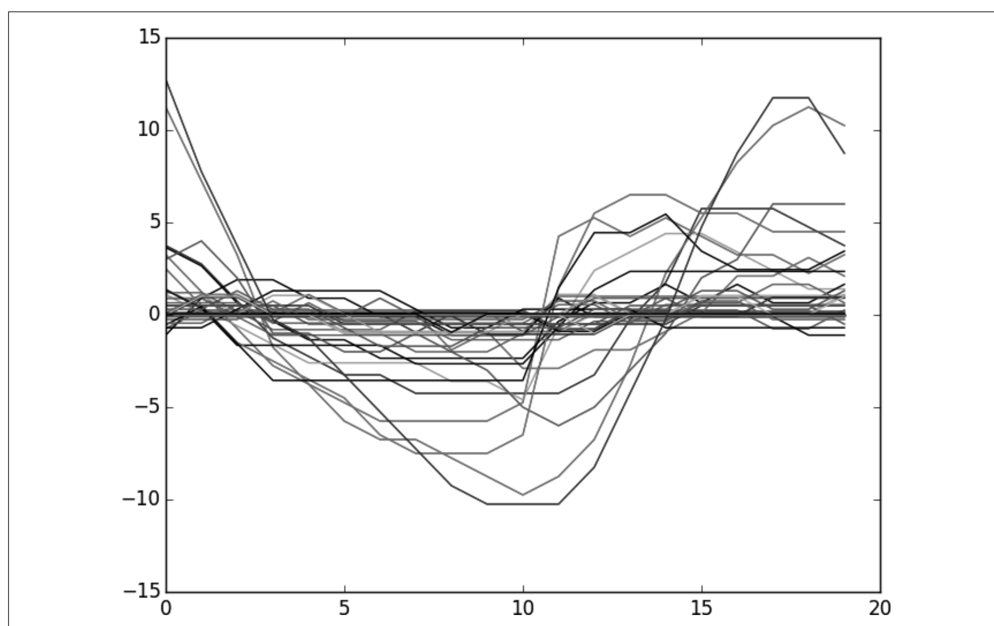


图 11-5：中部的时间序列的 50 个随机样本子集

在每个序列上应用任何用户定义函数也非常容易。只要使用 apply 方法，apply 底层会调用 RDD 的 .values().map()：

```
seriesRDD.apply(lambda x: x.argmin())
```

Thunder核心数据类型

更一般地说，Thunder 的两个核心数据类型 Series 和 Images 都继承自 Data 类型，而 Data 内部封装了一个 Python RDD 对象并对外提供部分 RDD API。Data 类代表键 – 值对的 RDD，键是语义标识符（比如空间坐标元组），值是一个由实际值组成的 NumPy 数组。比如，对 Images 对象而言，键可以是一个时间点，值是以 NumPy 格式数组存放的该时间点的图像。对 Series 对象而言，键可以是一个相应体元坐标的 *n* 维元组，值是表示该体元时间序列度量的一维 NumPy 数组。Series 中所有数组的维度必须相同。下面我们给出该对象的几个常用 API：

```
class Data:
    property dtype:
        # 这个RDD的值的Numpy数组的dtype

    # 此处定义了许多RDD的方法,比如first()、count()、cache()等

    # 此处定义了许多数组汇总方法,比如mean()和variance()等
    # 这些方法中dtype是不变的

class Series(Data):
    property dims:
        # 延迟计算Dimension对象。该RDD属性索引的键中编码了空间维度信息

    property index:
        # 一组Pandas Series对象风格的数组下标,采用Pandas Series对象样式

    # 此处定义了许多在集群中并行处理所有一维数组的方法,比如
    # normalize()、detrend()、select()和apply(),这些方法中dtype是不变的

    # 此处定义了并行汇总方法,比如seriesMax()和seriesStdev()等
    # 这些方法改变了dtype

    def pack():
        # 在客户端收集数据并从稀疏的RDD表示重新包装为稠密的NumPy数组,shape和dims对应

class Images(Data):
    property dims:
        # Dimension对象,与每个值数组的shape参数对象的NumPy shape参数对应

    property nimages:
        # RDD中图像的个数; 延迟执行RDD的count操作

    # 多个对图像进行汇总或处理的并行方法
    # 比如maxProjection()、subsample()、subtract()和apply()

    def toSeries():
        # 将数据重新组织为一个Series对象
```

通常，同样的数据集既可表示为 `Images` 对象也可表示为 `Series` 对象，这两个对象之间可以通过 shuffle 操作（代价可能非常高）进行相互转换（跟行式与列式表示相互转换类似）。

Thunder 的 `Data` 可以持久化为一组图像，按图像文件名的字母序排序。也可以持久化为一组 `Series` 对象的二元一维数组。要了解更多细节请参考文档。

11.4　用Thunder对神经元进行分类

在本节示例中，我们将使用 *K* 均值算法对不同的斑马鱼时间序列进行聚类。聚类之后这些时间序列将变成几个大类用以描述不同类型的神经行为。我们将使用 GitHub 资料库上存储的 `Series` 数据，该数据比之前我们使用的图像数据要大。但是这些数据的空间分辨率很低，不足以区分神经元个体。

首先我们来加载数据：

```
seriesRDD = tsc.loadSeries(
    'path/to/thunder/python/thunder/utils/data/fish/bin')
print seriesRDD.dims
print seriesRDD.index
...
Dimensions: min=(0, 0, 0), max=(75, 86, 1), count=(76, 87, 2)
[  0   1   2   3   4   5   6   ...   234 235 236 237 238 239]
```

结果表明图像的维度和之前一样，但时间点由 20 个变成了 240 个。为了得到最好的聚类结果，我们要对特征进行归一化。

```
normalizedRDD = seriesRDD.normalize(baseline='mean') ❶
```

❶ 这里的选项 `baseline='mean'` 在文档里找不到说明。Thunder 代码很清晰，很多时候其代码就可以隐含地表达我们的意图，而不用我们特别注释。

现在我们绘制一些时间序列图来看看这些时间序列的情况。使用 Thunder 可以在 RDD 上随机采样并按一定标准（比如默认的最小标准差）对集合元素进行过滤。为了选择一个合适的阈值，首先来计算每个时间序列的 stddev，然后对 10% 的样本值绘制直方图（如图 11-6 所示）：

```
stddevs = (normalizedRDD
    .seriesStdev()
    .values()
    .sample(False, 0.1, 0)
    .collect())
plt.hist(stddevs, bins=20)
```

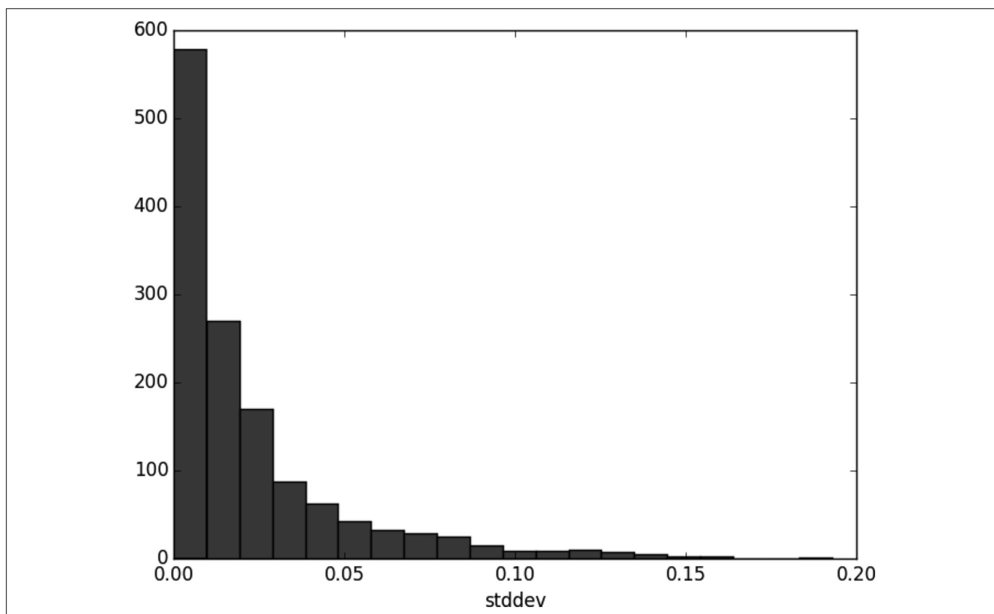


图 11-6：体元标准差分布

知道了标准差，我们选择阈值为 0.1，以便能得到大部分“活跃”的序列（见图 11-7）：

```
plt.plot(normalizedRDD.subset(50, thresh=0.1, stat='std').T)
```

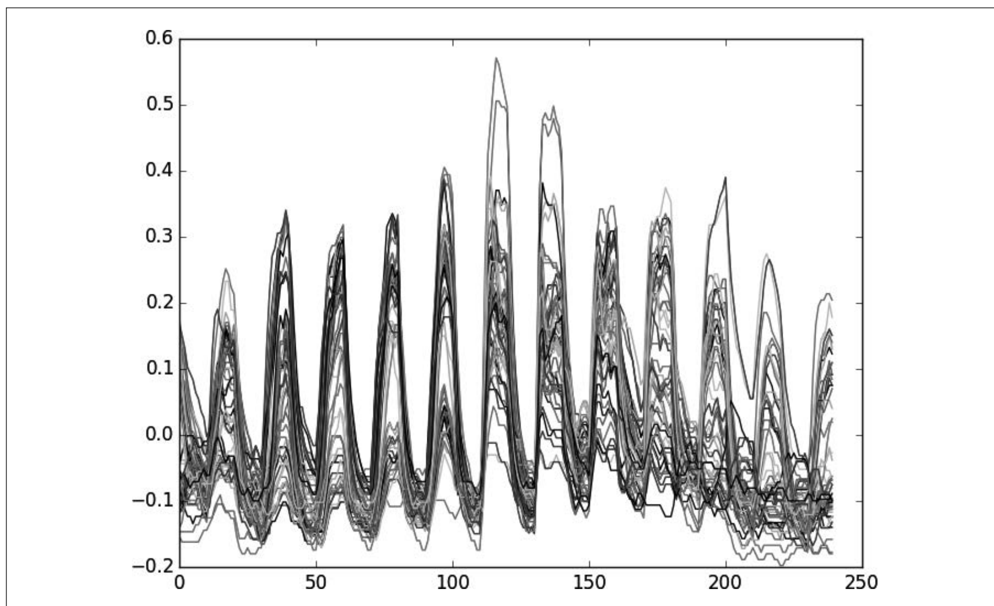


图 11-7：基于标准差的 50 个最活跃的时间序列

现在我们对数据有了一定了解，最后再来将体元聚类成不同行为模式。Thunder 为 RDD 实现了一个类似于 scikit-learn 风格的 API。有些情况下，Thunder 使用的是自己的实现（比如矩阵分解代码）。我们这里的示例中，Thunder 的 *K* 均值功能调用的是 MLlib Python API。下面对多个 *k* 值运行 *K* 均值聚类：

```
from thunder import KMeans
ks = [5, 10, 15, 20, 30, 50, 100, 200]
models = []
for k in ks:
    models.append(KMeans(k=k).fit(normalizedRDD))
```

现在对每个簇计算两个简单的误差指标。第一个指标简单地把时间序列到簇中心的欧氏距离求和。第二个指标是 `KMeansModel` 对象的一个内置指标：

```
def model_error_1(model):
    def series_error(series):
        cluster_id = model.predict(series)
        center = model.centers[cluster_id]
        diff = center - series
        return diff.dot(diff) ** 0.5

    return (normalizedRDD
        .apply(series_error)
        .sum())

def model_error_2(model):
    return 1. / model.similarity(normalizedRDD).sum()
```

我们对每个 *k* 值都计算这两个指标并将结果绘制成图 11-8：

```
import numpy as np
errors_1 = np.asarray(map(model_error_1, models))
errors_2 = np.asarray(map(model_error_2, models))
plt.plot(
    ks, errors_1 / errors_1.sum(), 'k-o',
    ks, errors_2 / errors_2.sum(), 'b:v')
```

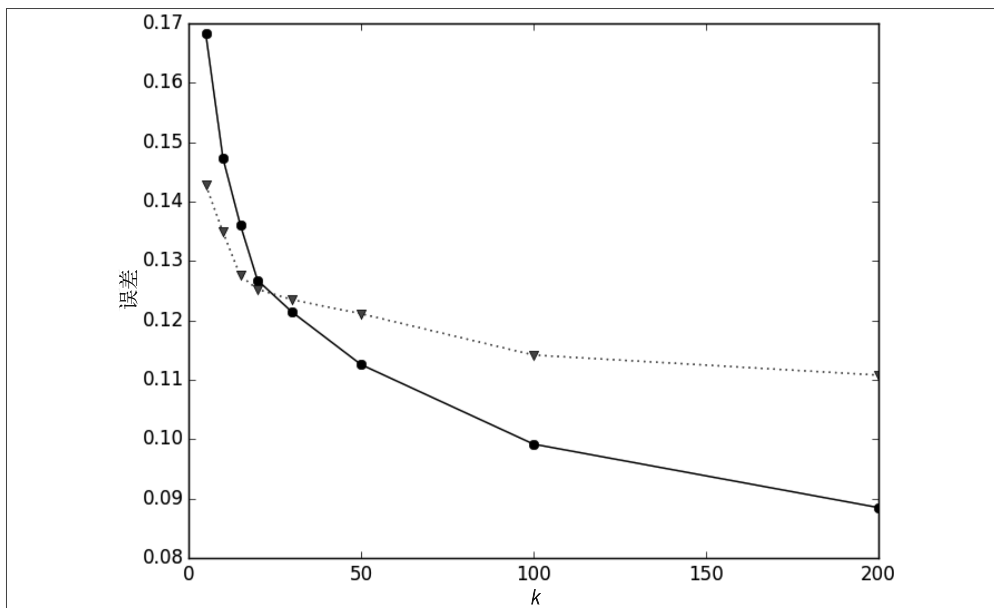


图 11-8：以 *k* 为变量的 *K* 均值误差指标函数（黑色圆点是 model_error_1，蓝色三角形代表 model_error_2）

我们预期这些指标通常是 *k* 的单调函数；曲线看起来在 *k*=20 点有一个明显的拐点。现在我们把从数据中学习得到的类簇中心画出来，如图 11-9 所示：

```
model20 = models[3]
plt.plot(model20.centers.T)
```

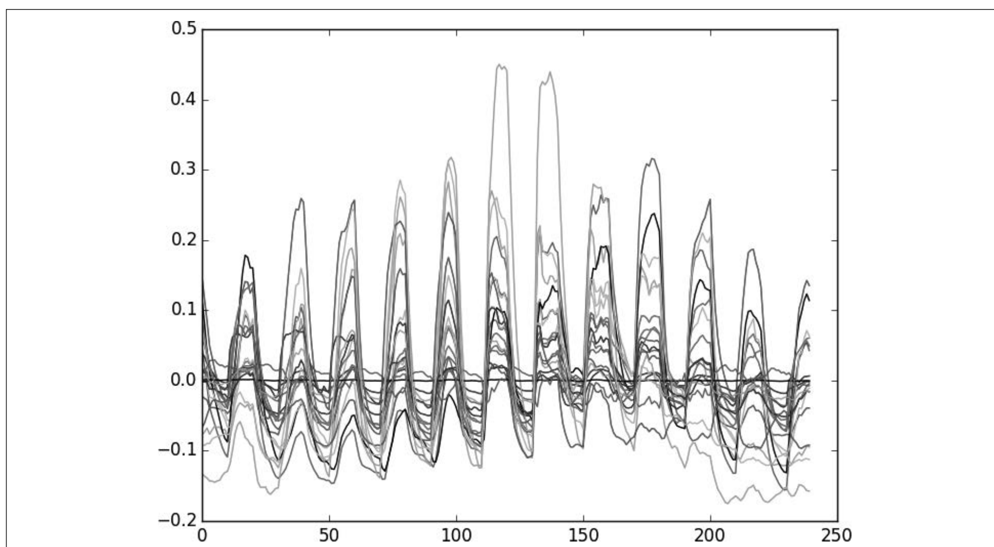


图 11-9：*k*=20 时的模型中心

给不同类簇的体元分配不同颜色并绘制图像本身也很简单，结果如图 11-10 所示：

```
from matplotlib.colors import ListedColormap
by_cluster = model20.predict(normalizedRDD).pack()
cmap_cat = ListedColormap(sns.color_palette("hls", 10), name='from_list')
plt.imshow(by_cluster[:, :, 0], interpolation='nearest',
    aspect='equal', cmap='gray')
```

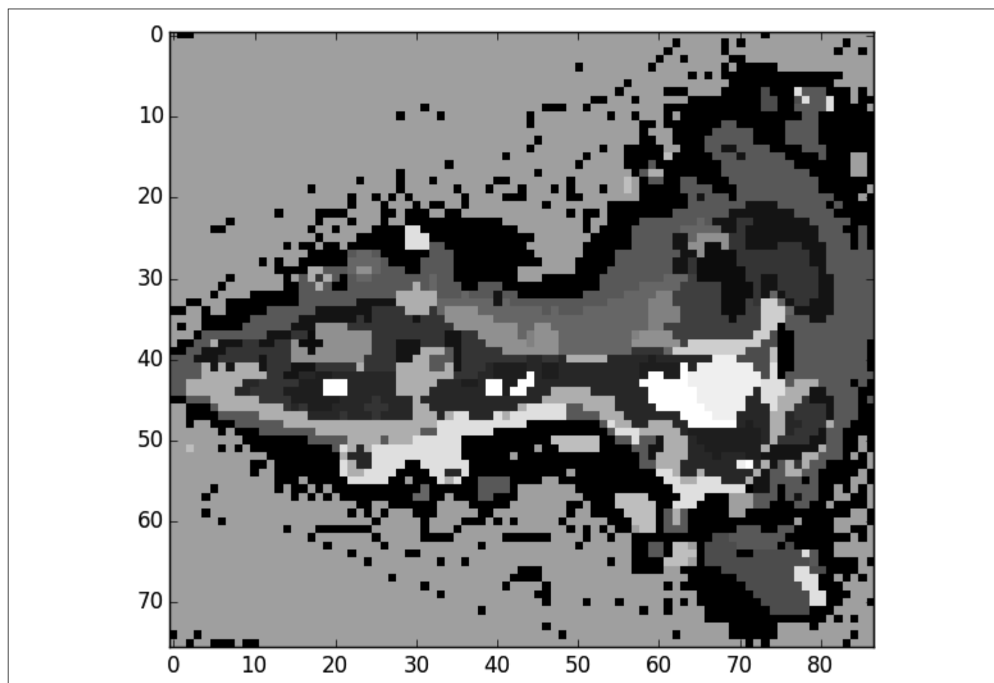


图 11-10：不同类簇的体元分配不同颜色的三维像素图

从图中很显然可以看出，学习模型得到的聚类一定程度上刻画了斑马鱼大脑的解剖结构。如果原始数据分辨率高到足以看清亚细胞结构，我们就可以先对体元进行 K 均值聚类，其中 k 等于图像数据中神经元的估计个数。然后，再定义每个神经元的时间序列，而这些时间序列可再用来聚类以确定神经元的不同功能类型。

11.5 小结

Thunder 项目还比较年轻，但功能已经比较丰富。除了时间序列统计和聚类，它还包含矩阵分解、回归 / 分类和可视化模块。Thunder 项目的文档和教程写得非常好，涵盖的功能也很多。如果想了解 Thunder 的使用，可以看一下 Thunder 作者在 2014 年 7 月的 *Nature Method* 杂志上发表的文章（http://www.nature.com/nmeth/journal/v11/n9/abs/nmeth.3041.html）。

附录A

Spark进阶

作者：Sandy Ryza

若想会写 Spark 程序，就必须理解 Spark 的转换、行动和 RDD。但若想写好 Spark 程序，就必须理解 Spark 的底层执行模型。只有这样才能领悟 Spark 程序的性能特点，才能在程序出错或运行缓慢的时候进行调试，才能理解 Spark 的用户接口。

一个 Spark 程序由一个*驱动程序*（driver）进程和一组散布在集群各节点上的*执行程序*（executor）进程组成。对于 `spark-shell` 来说，这个驱动程序进程就是与用户交互的进程，它负责控制作业的高层流程。执行程序进程负责以*任务*的形式执行作业，同时也负责根据用户要求将数据存入缓存。驱动程序和执行程序通常在整个应用运行期间都存在。一个执行程序对应一定数量的 slot 可供运行任务，在执行程序的生命周期内会同时运行多个任务。

执行模型的最上层是*作业*。在 Spark 应用程序内调用行动时会触发 Spark 作业来执行行动。要确定作业的基本信息，Spark 会检查行动的 RDD 依赖关系图并生成执行计划，执行计划从依赖关系中最靠前的 RDD 开始，将依赖关系路径上的 RDD 全部汇集起来，以得到行动的结果。执行计划将作业的转换部分组装成*阶段*。每个阶段对应一组*任务*，这些任务在不同的数据分区上执行的代码相同。每个阶段包含一系列转换，每个阶段内的转换在执行时不会对全体数据进行 shuffle。

那么 Spark 依据什么来判断是否需要对数据进行 shuffle 呢？对 `map` 等窄依赖转换所返回的

RDD，计算一个分区所需的数据都在父 RDD 的一个分区内。每个对象只依赖父 RDD 的一个对象。但是，Spark 也支持宽依赖转换，比如 `groupByKey` 和 `reduceByKey`。宽依赖中计算一个分区所需数据来自父 RDD 中多个分区。为完成这些操作，Spark 必须执行一次 shuffle，shuffle 将数据在集群内传输并得到一个新阶段，这个新阶段有一组新分区。

比如下面的代码执行时只包含一个阶段，原因就是三个操作的输出数据的分区和输入数据的分区都相同：

```
sc.textFile("someFile.txt").
  map(mapFunc).
  flatMap(flatMapFunc).
  filter(filterFunc).
  count()
```

在下面的代码中，我们要找到在一个文本文件中出现次数超过 1000 的单词中每个字母的出现次数。这段代码将分成三个阶段执行，由于计算操作 `reduceByKey` 的输出需要按数据的键对数据进行重新分区，所以 `reduceByKey` 将导致产生新的阶段：

```
val tokenized = sc.textFile(args(0)).flatMap(_.split(' '))
val wordCounts = tokenized.map((_, 1)).reduceByKey(_ + _)
val filtered = wordCounts.filter(_._2 >= 1000)
val charCounts = filtered.flatMap(_._1.toCharArray).map((_, 1))
  reduceByKey(_ + _)
charCounts.collect()
```

在每个阶段的边界处，数据被父阶段中的任务写入磁盘，然后由子阶段中的任务通过网络读取。因此阶段边界代价很高，应该尽可能避免。父阶段的数据分区数与子阶段的分区数可以不同。对那些可能触发新阶段边界的转换来说，它们通常会接收一个 `numPartitions` 参数，这个参数决定数据在子阶段中的分区数。和 MapReduce 作业中 reducer 的个数对 MapReduce 作业的调优一样，阶段边界的分区数对应用性能至关重要。分区数太少会导致每个任务处理的数据量太多从而拖慢作业执行速度。由于聚合运算在数据不能全部放入内存时会溢写磁盘，所以一个任务的执行时间往往和分配给它的数据量呈非线性关系。同时，分区数太多将导致父阶段中按父分区对记录排序时的开销增加，也会导致子阶段里调度和启动任务相关的开销更大。

A.1　序列化

作为一个分布式系统，Spark 常常需要对运算中的原始 Java 对象进行序列化。当需要以序列化的形式缓存数据，或在 shuffle 时利用网络传输数据时，Spark 需要将 RDD 的内容表示为字节流。Spark 允许以可插拔的方式对序列化和反序列化设置一个 `Serializer`。Spark 默认使用 Java 语言的 Object Serialization 技术。只要对象实现了 `Serializable` 接口，该技术就可以对其进行序列化。但是我们一般会推荐大家在 Spark 中使用 Kryo 序列化技术。

Kryo 的序列化形式更加紧凑而且反序列化的速度快得多。要实现这个效果，关键是要首先向 Kryo 注册应用所需的全部定制类。如果不注册，Kryo 也不出错，但序列化将占用更多空间和时间，因为每条记录之前还必须写入类的名字。开启 Kryo 并注册类的代码如下：

```
val conf = new SparkConf().setAppName("MyApp")
conf.registerKryoClasses(
  Array(classOf[MyCustomClass1], classOf[MyCustomClass2]))
```

也可以通过配置文件向 Kryo 注册类。如果使用 `spark-shell`，只能通过配置文件进行 Kryo 注册。我们可以在 spark-defaults.conf 中加入如下内容进行配置：

```
spark.kryo.classesToRegister=org.myorg.MyCustomClass1,org.myorg.MyCustomClass2
spark.serializer=org.apache.spark.serializer.KryoSerializer
```

Spark 之上的工具（比如 GraphX 和 MLlib）可能有自己的定制类，可以用如下 Spark 工具方法来进行注册：

```
GraphXUtils.registerKryoClasses(conf)
```

A.2 累加器

Spark 的累加器用于在作业运行的同时收集某些统计信息。每个任务执行时能增加累加器的值，驱动程序也能读取累加器的值。比如，累加器可以用于计算作业中非法记录的条数或优化过程中的阶段累积误差。

举个例子，Spark MLlib 工具的 *K* 均值聚类实现就利用了累加器来计算优化过程中的阶段累积误差。算法的每次迭代过程开始时赋予一组簇群中心，然后使用这些簇群中心计算一组新的簇群中心。算法要优化的聚类成本函数是每个点到最近簇群中心的距离之和。为了确定算法何时退出，需要在把点归到相应簇群之后计算该成本函数：

```
var prevCost = Double.MaxValue
var cost = 0.0
var clusterCenters = initialCenters(k)
while (prevCost - cost > THRESHOLD) {
  val costAccum = sc.accumulator(0, "Cost")
  clusterCenters = dataset.map {
    // 找到一个点的最近簇群中心点并计算点与最近簇群中心的距离
    val (newCenter, distance) = closestCenterAndDistance(_,
      clusterCenters)
    costAccum += distance
    (newCenter, _)
  }.aggregate( /* 对分配给某个簇群中心的所有点求平均 */ )

  prevCost = cost
  cost = costAccum.value
}
```

该示例中累加器的 `add` 函数是整数的加法，累加器也能支持其他满足结合律的函数，比如对集合求并集。

任务只有在第一次运行时才能修改累加器。举个例子，如果一个任务顺利执行完成，但由于该任务的输出结果丢失需要重新运行任务，这时任务就不能再次增加累加器的值。

如果没有累加器，要得到相同结果需要缓存 RDD 并且需要在 RDD 上运行另一个行动。有了累加器就不用缓存数据，也不用执行另一个作业，这样得到相同结果的效率就大大提高。从这个意义上看累加器是一种优化。

A.3　Spark与数据科学家的工作流

有几个 Spark 转换和行动对探索和认识新数据集特别有用。这些算子中有些用到随机函数，有些情况下需要使用一个随机种子来保证结果的确定性，比如在任务结果发生丢失并需要重新计算时，或在多个行动都要用到同一个没有缓冲的 RDD 时。

`take` 可以查看 RDD 中前面几个元素，而且代价很小。如果在 `take` 操作之前没有其他运算需要进行 shuffle，`take` 运算只要计算第一个分区中的元素：

```
myFirstRdd.take(2)
14/09/29 12:09:13 INFO SparkContext: Starting job: take ...
14/09/29 12:09:13 INFO SparkContext: Job finished: take ...
res1: Array[Int] = Array(1, 2)
```

可以用 `takeSample` 对数据进行采样，并将采样结果导入驱动程序以便进行绘图或本地操作，或者导出到另一个环境（如 R）中进行非分布式分析。它的第一个参数 `withReplacement` 表示是否允许重复采样：

```
myFirstRdd.takeSample(true, 3)
14/09/29 12:14:18 INFO SparkContext: Starting job: takeSample ...
14/09/29 12:14:18 INFO SparkContext: Job finished: takeSample ...
res11: Array[Int] = Array(2, 1, 1)

myFirstRdd.takeSample(true, 5)
14/09/29 12:14:18 INFO SparkContext: Starting job: takeSample ...
14/09/29 12:14:18 INFO SparkContext: Job finished: takeSample ...
res11: Array[Int] = Array(2, 1, 1, 2, 4)

myFirstRdd.takeSample(false, 3)
14/09/29 12:14:18 INFO SparkContext: Starting job: takeSample ...
14/09/29 12:14:18 INFO SparkContext: Job finished: takeSample ...
res11: Array[Int] = Array(2, 1, 4)
```

`top` 返回数据集中按给定 `Ordering` 方式排序的最大的 k 条记录。许多场景中都要用到它，比如对每条记录打分之后检查得分最高的记录。与 `top` 正好相反，`takeOrdered` 返回最小的记录。下面的示例代码生成 0 到 100 的整数随机数，然后返回出现次数最多和最少的整数：

```
import scala.util.Random

val randNums = Seq.fill(10000)(Random.nextInt(100))
val numberCounts = sc.parallelize(randNums).map(x => (x, 1)).
  reduceByKey(_ + _)

numCounts.top(3)(Ordering.by(_._2))
14/09/30 23:38:42 INFO SparkContext: Starting job: top ...
14/09/30 23:38:42 INFO SparkContext: Job finished: top ...
res6: Array[(Int, Int)] = Array((58,127), (25,120), (28,120))

numCounts.takeOrdered(3)(Ordering.by(_._2))
14/09/30 23:39:54 INFO SparkContext: Starting job: takeOrdered ...
14/09/30 23:39:54 INFO SparkContext: Job finished: takeOrdered ...
res7: Array[(Int, Int)] = Array((74,78), (92,79), (8,80))
```

`top` 函数先以分布式的方式在每个分区内找出最大的 *k* 个值，然后把这些值都传到驱动程序端，之后在驱动程序端里对所有传过来的值求最大的 *k* 个值。这种方法在 *k* 较小时是不错的，但如果 *k* 值很大，或比一个分区中记录数还要大，它就要把整个数据集都传到驱动程序上。对于这种情况，我们建议先用 `sortByKey` 分布式地对整个数据集排序，然后再取前 *k* 个元素：

```
numberCounts.map(_.swap).sortByKey().map(_.swap).take(5) ❶
14/10/06 13:19:08 INFO SparkContext: Starting job: sortByKey ...
14/10/06 13:19:08 INFO DAGScheduler: Job 2 finished: take ...
res3: Array[(Int, Int)] = Array((87,73), (19,76), (75,76), (25,81), (22,81))
```

❶ 按整数大小排序，而不是按它们的个数排序，所以我们需要对调元组的顺序。

这段代码把数据传到驱动程序端，但 `sample` 常用于在一系列处理过程中生成分布式数据集。`sample` 通过对父 RDD 进行采样生成一个 RDD。和 `takeSample` 类型相似，`sample` 也支持重复采样和非重复采样。它接收一个表示采样比例的参数。当进行重复采样时，Spark 接收一个大于 1 的值，这样可以扩充样本数据集以便对作业管道进行压力测试。`sample` 还可用于改变数据的顺序。这在运行随机梯度下降之类的在线算法时是个不错的作法：

```
val bootstrapSample = rdd.sample(true, .6)

val permuted = rdd.sample(false, 1.0)
```

`randomSplit` 返回多个 RDD，它们合在一起就是父 RDD。`randomSplit` 常常用于将数据集分成训练集和测试集。

```
fullData.cache()
val (train, test) = fullData.randomSplit(Array(0.6, 0.4))
```

A.4　文件格式

Spark 示例代码常常使用 textFile，如果要存储大型数据集，我们还是推荐使用二进制格式，因为既节省空间还有类型信息。Avro 和 Parquet 分别是 Hadoop 集群上用于存储数据的行式格式和列式格式。磁盘上这两种格式的数据在读入内存后都可以用 Avro 表示。

下面的示例演示了如何读取 Avro 格式的 name 和 favorite_color 字段：

```
import org.apache.hadoop.io.NullWritable
import org.apache.hadoop.mapreduce.Job
import org.apache.hadoop.mapreduce.lib.input.FileInputFormat
import org.apache.avro.generic.GenericRecord
import org.apache.avro.mapred.AvroKey
import org.apache.avro.mapreduce.AvroKeyInputFormat

val conf = new Job()
FileInputFormat.setInputPaths(conf, inPaths)
val records = sc.newAPIHadoopRDD(conf.getConfiguration,
  classOf[AvroKeyInputFormat[GenericRecord]],
  classOf[AvroKey[GenericRecord]],
  classOf[NullWritable]).map(_._1.datum)

val namesAndColors = records.map(x =>
  (x.get("name"), x.get("favorite_color")))
```

类似地，可以这样读取 Parquet 格式数据：

```
import org.apache.hadoop.mapreduce.Job
import org.apache.hadoop.mapreduce.lib.input.FileInputFormat
import org.apache.avro.generic.GenericRecord
import parquet.hadoop.ParquetInputFormat

val conf = new Job()
FileInputFormat.setInputPaths(conf, inPaths)
val records = sc.newAPIHadoopRDD(conf.getConfiguration,
  classOf[ParquetInputFormat],
  classOf[Void],
  classOf[GenericRecord]).map(_._2)

val namesAndColors = records.map(x =>
  (x.get("name"), x.get("favorite_color")))
```

注意 Avro 支持两种内存表示。

- Avro generics 将记录表示为一个键为 String、值为 Object 的 map。在研究一个新数据集时这种方式很容易上手，但因为要把原始类型包装为对象，所以它的效率不高。
- Avro specifics 则利用代码生成技术产生 Avro 类型对应的 Java 类。为了节省篇幅，我们这里就不详细介绍了。本书的附带 GitHub 资料库上有一个例子，有兴趣的读者可以参考一下。

A.5 Spark子项目

Spark Core 是指 Spark 的分布式执行引擎和 Spark 的核心 API。除了 Spark Core 之外，Spark 还包含了若干个子项目，它们在 Spark Core 之上提供附加功能。后面几节将详细介绍这些子项目。这些子项目目前处于不同开发阶段。Spark 的核心 API 保持稳定和兼容，但 Spark 的这些子项目则处于 alpha 或 beta 版本，其 API 可能会变化。

A.5.1 MLlib

MLlib 在 Spark 之上实现了一组机器学习算法。项目的目标是为标准算法提供高质量的实现，它主要强调算法的可维护性和一致性，而不是广度。表 A-1 列出了截至本书写作时 MLlib 支持的算法。

表A-1：MLlib算法

	离散算法	连续算法
监督学习	决策森林、朴素贝叶斯、线性支持向量机、逻辑回归及其正则化变体	线性回归、正则化变体（Ridge/L2、LASSO/L1）、决策森林
非监督学习	*K* 均值聚类	奇异值分解、基于交替最小二乘的 UV 分解

MLlib 把数据表示为稀疏或稠密的 `Vector` 对象。它提供了操作 `Matrix` 和 `RowMatrix` 对象的轻量级线性代数功能。`Matrix` 表示本地矩阵，而 `RowMatrix` 表示向量的分布式集合。MLlib 使用 Scala 线性代数工具 Breeze 进行底层的数据布局和操作。

截至本书写作时 MLlib 处于 beta 版本，某些 API 可能在以后版本中发生变化。

本书有几章都使用了 MLlib 的算法：

- 第 3 章使用了 MLlib 的交替最小二乘算法进行推荐；
- 第 4 章使用了 MLlib 的随机决策树实现进行分类；
- 第 5 章使用了 MLlib 的 *K*- 均值聚类算法进行异常检测；
- 第 6 章使用了 MLlib 的奇异值分解算法进行文本分析。

A.5.2 Spark Streaming

Spark Streaming 基于 Spark 引擎对数据进行不间断处理。通常 Spark 作业针对大数据集进行一次性的批处理，然而 Spark Streaming 则主要针对低延时（数百毫秒级别）场景：只要有新数据出现，就需要对其进行准实时的转换和处理。Spark Streaming 的工作原理是在小时间间隔里对数据进行汇集从而形成小批量，然后在小批量数据上运行作业。它常用于快速给出报警，为控制台提供最新信息，也用于需要进行复杂分析的场景。比如异常检查中一个常见的用例，就是对一批批的数据进行 *K* 均值聚类，并在聚类中心偏离正常情况时触发一个警告。

A.5.3 Spark SQL

Spark SQL 基于 Spark 引擎对 HDFS 上的数据集或已有的 RDD 执行 SQL 查询。有了 Spark SQL 就能在 Spark 程序里用 SQL 语句操作数据了。

```
import org.apache.spark.sql.hive.HiveContext

val sqlContext = HiveContext(sc)

val schemaRdd = sqlContext.sql("FROM sometable SELECT column1, column2, column3")
schemaRdd.collect().foreach(println)
```

Spark SQL 的核心数据结构是 `SchemaRDD`，包含了模式信息，模式信息给出了每列的名称和类型。通过在已有 RDD 上标注类型信息，可以编程式地创建 `SchemaRDD`，也可以像前面示例代码中一样利用 Hive 的 Schema 信息来创建 `SchemaRDD`。

截至本书写作时，Spark SQL 处于 alpha 版本状态，其 API 在将来版本中可能发生变化。

A.5.4 GraphX

GraphX 是 Spark 的子项目，它基于 Spark 引擎进行图计算。在计算机科学中，图由一组顶点和连接顶点的一组边构成。图算法可用于研究社交网络中的用户关系，也可用于根据互联网上的链接来源来判断网页的重要程度或分析实体之间的连接结构。GraphX 用两个 RDD（即顶点 RDD 和边 RDD）来表示图。GraphX 的 API 类似 Google 的图计算系统 Pregel，使用 GraphX 只需区区几行代码就可以表示 PageRank 这样常用的算法。

截至本书写作时，GraphX 处于 alpha 版本状态，其 API 在将来版本中可能发生变化。第 6 章就利用 GraphX 分析了论文引用关系图。

附录B

即将发布的MLlib Pipelines API

作者：Sean Owen

Spark 项目发展迅速。2014 年 8 月我们开始撰写本书时 Spark 1.1.0 版本即将发布，但到 2015 年 4 月本书开始印刷时，Spark 1.2.1 已然成为媒体新宠了。单单这个 Spark 1.2.1 版本就增加了将近 1000 项改进和问题修复。

为了在小版本之间保持 API 稳定，项目尽量保持二进制和源代码的兼容性，MLlib 的大部分 API 也确实是稳定的。因此，本书的示例代码应该能在 Spark 1.3.0 及后续 1.x 版本上运行；这些 API 实现不会消失。但是对于那些处于发展中的实验性或只面向开发人员的 API，新版本常常增加新 API 或修改已有 API。

本书已经讨论了 Spark MLlib 的种种优秀功能，但对于一本讲述 Spark 1.2.1 版本的书，我们还必须提及 MLlib 的一个重要方向，即 Pipelines API，虽然当前它的部分 API 还处于实验状态。

Pipelines API 正式发布只有一个月左右，很多事情还在不断发展中，它还远没有达到完成的状态，因此我们也无法基于 Pipelines API 撰写本书。但是了解目前 MLlib 的已有功能仍然是有帮助的。

本附录将快速介绍新的 Pipelines API。Pipelines API 是 Spark 项目问题跟踪器中 SPARK-3530（https://issues.apache.org/jira/browse/SPARK-3530）的成果。

B.1 不单单局限于建模

就项目目标和范围而言，当前的 MLlib 和其他机器学习工具没什么太大差别。它提供了机器学习算法的实现，而且仅仅是最核心的算法实现。每个算法将预处理后的数据以 `LabeledPoint` 或 `Rating` 等 RDD 作为输入，并且返回某种结果模型的表示，这就是当前的 MLlib。虽然它很有用，但仅仅有算法还不足以解决实际的机器学习问题。

可能你已经注意到了，本书每一章的大部分源代码都是为了从原始输入中准备特征并对特征进行转换，然后以某种方式评价模型。在整个过程中，调用 MLlib 算法只是其中很小的一部分，而且是相对简单的部分。

这些额外的处理对所有机器学习问题都是普遍存在的。实际上部署一个生产机器学习模型可能需要更多工作：

1．将原始数据解析成特征
2．将特征转换成其他特征
3．构建模型
4．评价模型
5．模型超参数调优
6．重建和部署模型
7．实时模型更新
8．根据模型实时进行查询

从这个角度看，MLlib 只处理了第 3 项，这只是很小一部分。新的 Pipelines API 将扩展 MLlib，MLlib 将作为一个框架以涵盖第 1 项到第 5 项。在本书中这几项工作我们是以不同方式手工完成的。

其他项也是重要的，但可能不会在 MLlib 的项目范围内。这些工作可结合 Spark Streaming、JPMML（https://github.com/jpmml）、REST（http://en.wikipedia.org/wiki/Representational_state_transfer）API、Apache Kafka（http://kafka.apache.org/）等工具来完成。

B.2 Pipelines API

新 Pipelines API 为这些机器学习任务提供了一个简洁的视图：每个阶段数据都转换成其他数据，并且最终转换成一个模型，而模型这个实体本身只是将一种数据（输入）转换成另一种数据（预测）而已。

这里数据总是表示为一个特殊的 RDD，这一想法借鉴自 Spark SQL 的 `org.apache.spark.sql.SchemaRDD` 类。顾名思义，`SchemaRDD` 包含了类似表的数据，其中每个元素是一个 `Row`。每个 `Row` 都有相同的“列”，列的模式是已知的，包括名称、类型等。

这样我们能够以类 SQL 的方式便捷地对数据进行转换、投影、过滤和联结操作。结合其他 Spark API，基本上就回答了前面列表中的第 1 项。

更重要的是，有了模式信息之后机器学习算法就能更准确更自动地区分数值型特征和类别型特征。输入不再仅仅是 `Double` 数组，调用者还将指定输入中哪些值实际上是类别型。

新 Pipelines API 位于 `org.apache.spark.ml` 包里，至少目前已经发布的实验性 API 预览版都在该包里面。相比之下，当前稳定版本的 API 都在 `org.apache.spark.mllib` 包里面。

`Transformer` 抽象表示将数据转换成其他数据，即从一个 `SchemaRDD` 到另一个 `SchemaRDD` 的转换逻辑。`Estimator` 表示从一个 `SchemaRDD` 构建机器学习模式即 `Model` 的逻辑，`Model` 本身也是 `Transformer`。

`org.apache.spark.ml.feature` 提供了一些辅助功能，比如在 TF-IDF 中计算词项频率的 `HashingTF`，或者进行简单解析的 `Tokenizer`。这样新 API 就可以支持第 2 项工作。

Pipeline 抽象表示一系列 `Transformer` 和 `Estimator` 对象，可以在输入 `SchemaRDD` 上连续使用 `Transformer` 和 `Estimator` 对象以输出一个 `Model`。因为 Pipeline 生成一个模型，所以 Pipeline 本身是一个 `Estimator`。

我们可以对这种设计作出一些有意思的组合。Pipeline 可以包含一个 `Estimator`，这就意味着它可以在内部构建一个 `Model`，而 `Model` 然后又可以用作 `Transformer`。也就是说，Pipeline 可以在内部构建并使用算法进行预测，这可以作为一个更大工作流的一部分。这同时也意味着，Pipeline 内部实际上也可以包含其他 Pipeline 实例。

为了支持第 3 项任务，新的实验性 API 已经简单实现了至少一个实际模型构建算法，那就是 `org.apache.spark.ml.classification.LogisticRegression`。比如，虽然我们可以将已有的 `org.apache.spark.mllib` 实现包装成一个 `Estimator`，但新 API 已经为我们实现逻辑回归重写了代码。

`Evaluator` 抽象支持模型预测评价。`Evaluator` 反过来又用于 `org.apache.spark.ml.tuning` 的 `CrossValidator` 类中，从而实现从 `SchemaRDD` 创建和评价许多 `Model` 实例，因此 `Evaluator` 也是 `Estimator`。`org.apache.spark.ml.params` 中的辅助性 API 定义了超参数和网格搜索参数，可以用于 `CrossValidator`。这些包帮助我们处理第 4 项和第 5 项任务，也就是在一个更大的工作流中进行模型评价和调优。

B.3 文本分类示例演示

Spark Examples 模块提供了一个如何使用新 API 的示例，包含在 `org.apache.spark.examples.ml.SimpleTextClassificationPipeline` 类中，它的行动如图 B-1 所示：

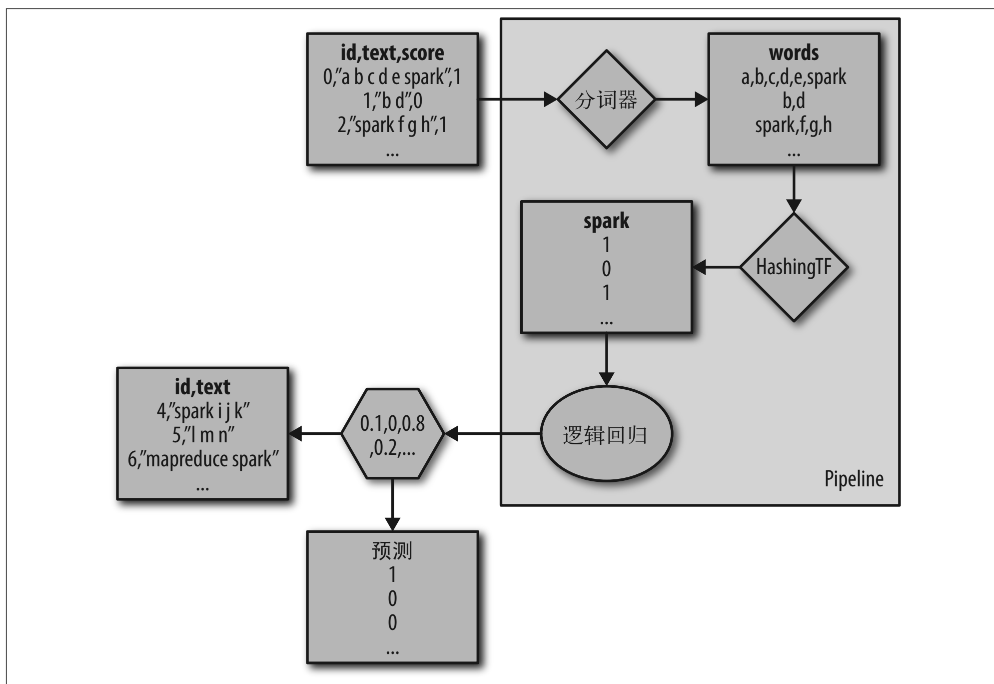


图 B-1：简单文本分类的 Pipeline

输入为文档对象，包含 ID、text 和 score（标号）。虽然 `training` 不是 `SchemaRDD`，但后面我们隐式将它转换成了 `SchemaRDD`：

```
val training = sparkContext.parallelize(Seq(
  LabeledDocument(0L, "a b c d e spark", 1.0),
  LabeledDocument(1L, "b d", 0.0),
  LabeledDocument(2L, "spark f g h", 1.0),
  LabeledDocument(3L, "hadoop mapreduce", 0.0)))
```

`Pipeline` 用到了两种 `Transformer` 实现。首先 `Tokenizer` 用空格将文本拆分成单词。接着 `HashingTF` 为每个单词计算词项频率。最后 `LogisticRegression` 把这些词频作为输入特征创建分类器，代码如下：

```
val tokenizer = new Tokenizer().
  setInputCol("text").
  setOutputCol("words")
val hashingTF = new HashingTF().
  setNumFeatures(1000).
  setInputCol(tokenizer.getOutputCol).
  setOutputCol("features")
val lr = new LogisticRegression().
  setMaxIter(10).
  setRegParam(0.01)
```

我们将这些操作合并到一个 `Pipeline` 中，让 `Pipeline` 实际执行从输入训练数据中构造模型的工作：

```
val pipeline = new Pipeline().
  setStages(Array(tokenizer, hashingTF, lr))
val model = pipeline.fit(training) ❶
```

❶ 隐式转换为 `SchemaRDD`。

最后，我们将模型用于新文档的分类。注意 `model` 实际上是一个包含所有转换逻辑的 `Pipeline`，而不只是一个对分类模型的调用，代码如下：

```
val test = sparkContext.parallelize(Seq(
  Document(4L, "spark i j k"),
  Document(5L, "l m n"),
  Document(6L, "mapreduce spark"),
  Document(7L, "apache hadoop")))
model.transform(test).
  select('id, 'text, 'score, 'prediction). ❶
  collect().
  foreach(println)
```

❶ 这里不是字符串，而是 Expressions 语法。

如果要实现相同功能，相比当前基于 MLlib API 的手工代码，基于 Pipeline API 的代码更简单，结构更清晰，也更利于重用。

期待 Spark 1.3.0 及后续版本中 `org.apache.spark.ml` Pipeline API 有更多新功能和改进！

作者介绍

Sandy Ryza 是 Cloudera 公司资深数据科学家，同时也是 Apache Spark 项目的活跃代码贡献者。最近他领导了 Cloudera 公司的 Spark 开发工作。Sandy 目前的工作是帮助客户在 Spark 上开发分析型应用。Sandy 还是 Hadoop 项目管理委员会委员。

Uri Laserson 是 Cloudera 公司资深数据科学家，专注于 Hadoop 生态系统中的 Python 部分。他同时也帮助客户用 Hadoop 解决各种问题，主要集中在生命科学和医疗领域。在加入 Cloudera 公司之前，Uri 在麻省理工学院攻读生物医学工程博士学位，期间和他人一起创建了致力于下一代诊断技术的 Good Start Genetics 公司。

Sean Owen 是 Cloudera 公司 EMEA 地区的数据科学总监。Sean 是 Apache 机器学习项目 Mahout 的代码提交者和关键代码贡献者。Mahout 项目中的 Taste 推荐引擎框架就出自 Sean 之手。Sean 也是 Apache Spark 项目的代码提交者。他创立了基于 Spark、Spark Streaming 和 Kafka 的 Hadoop 实时大规模学习项目 Oryx（之前称为 Myrrix）。

Josh Wills 是 Cloudera 公司高级数据科学总监，致力于与客户和工程师一起开发基于 Hadoop 的各行业解决方案。他是 Apache Crunch 项目的发起者和副总裁。Crunch 项目的目的是优化 Java 语言的 MapReduce 和 Spark 处理管道。在加入 Cloudera 公司之前，Josh 就职于 Google 公司，期间他开发了 Google 公司的广告拍卖系统并领导开发了 Google+ 的分析基础设施。

封面介绍

本书封面上的动物游隼是世界上最常见的掠食鸟类之一，地球上除了南极洲之外都可以见到它的身影。游隼的栖息地非常广泛，包括城市、热带、沙漠和苔原。有些游隼会从越冬地迁徙很长的距离到达夏季栖息地。

游隼是世界上飞行速度最快的鸟类，其俯冲速度达到每小时 200 英里。游隼的食物是其他鸟类，比如鸣鸟和野鸭，同时也吃蝙蝠，它们可以在半空中抓住猎物。

成年游隼的翅膀为蓝灰色，背部为黑褐色，腹部为米色且带有褐色斑点，脸部为白色，面颊上有黑色条纹。游隼的鸟嘴呈钩形，并且有一双有力的爪子。游隼的名字来自拉丁语“peregrinus”，意思是“盘旋”。游隼深受放鹰者的喜爱，数百年来都出现在放鹰运动中。

O’Reilly 用在封面上的很多动物都是濒危物种，它们全都对这个世界很重要。如果你想帮助它们，请访问 animals.oreilly.com/。

封面图片源自 Lydekker 所著的 *The Royal Natural History*。

O'REILLY®

Spark高级数据分析

这是一本实用手册，四位作者均是Cloudera公司的数据科学家，他们联袂展示了利用Spark进行大规模数据分析的若干模式，而且每个模式都自成一体。他们将Spark、统计学方法和真实数据集结合起来，通过实例向读者讲述了怎样解决分析型问题。

本书首先介绍了Spark及其生态系统，接着详细介绍了将分类、协同过滤及异常检查等常用技术应用于基因学、安全和金融领域的若干模式。如果你对机器学习和统计学有基本的了解，并且会用Java、Python或Scala编程，这些模式将有助于你开发自己的数据应用。

本书介绍了以下模式：

- **音乐推荐和Audioscrobbler数据集**
- **用决策树算法预测森林植被**
- **基于*K*均值聚类进行网络流量的异常检测**
- **基于潜在语义分析技术分析维基百科**
- **用GraphX分析伴生网络**
- **对纽约出租车轨迹进行空间和时间数据分析**
- **通过蒙特卡罗模拟来评估金融风险**
- **基因数据分析和BDG项目**
- **用PySpark和Thunder分析神经图像数据**

Sandy Ryza是Cloudera公司资深数据科学家，Apache Spark项目的活跃代码贡献者。最近领导了Cloudera公司的Spark开发工作。他还是Hadoop项目管理委员会委员。

Uri Laserson是Cloudera公司资深数据科学家，专注于Hadoop生态系统中的Python部分。

Sean Owen是Cloudera公司EMEA地区的数据科学总监，也是Apache Spark项目的代码提交者。他创立了基于Spark、Spark Streaming和Kafka的Hadoop实时大规模学习项目Oryx（之前称为Myrrix）。

Josh Wills是Cloudera公司的高级数据科学总监，Apache Crunch项目的发起者和副总裁。

DATA/SPARK

封面设计：Ellie Volckhausen　张健

图灵社区：iTuring.cn
热线：(010)51095186转600

分类建议　计算机/数据分析

人民邮电出版社网址：www.ptpress.com.cn

O'Reilly Media, Inc.授权人民邮电出版社出版



ISBN 978-7-115-40474-9
定价：59.00元

看完了

如果您对本书内容有疑问，可发邮件至 contact@turingbook.com，会有编辑或作译者协助答疑。也可访问图灵社区，参与本书讨论。

如果是有关电子书的建议或问题，请联系专用客服邮箱:
ebook@turingbook.com。

在这可以找到我们:

微博 @图灵教育 : 好书、活动每日播报
微博 @图灵社区 : 电子书和好文章的消息
微博 @图灵新知 : 图灵教育的科普小组
微信 图灵访谈 : ituring_interview，讲述码农精彩人生
微信 图灵教育 : turingbooks